

Ein Mikro-Makro-Übergang für die nichtlineare atomare Kette mit Temperatur

D I S S E R T A T I O N

zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium
(Dr. rer. nat.)
im Fach Mathematik

eingereicht an der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät II
Humboldt-Universität zu Berlin

von
Dipl.-Math. Michael Herrmann
geboren am 29.06.1973 in Berlin

Präsident der Humboldt-Universität zu Berlin:

Prof. Dr. Jürgen Mlynek

Dekan der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät II:

Prof. Dr. Uwe Küchler

Gutachter:

1. Prof. Dr. Jürgen Sprekels
2. Priv.-Doz. Dr. Wolfgang Dreyer
3. Prof. Dr. Alexander Mielke

eingereicht am: 10. Juli 2004

Tag der mündlichen Prüfung: 20. Dezember 2004

Abstract

The subject matter of this thesis is a *micro-macro transition* for the atomic chain with nearest neighbor interaction. The interaction potential is assumed to be nonlinear but convex, and the dynamics of the chain is governed by NEWTON's law of motion. To establish the micro-macro transition we choose an appropriate *scaling*, and let the number of particles tend to infinity. We mainly concentrate on the case with *temperature*, and therefore we have to describe microscopic oscillations on the macroscopic scale.

We start with an introduction in the first chapter. Afterwards in the second chapter we summarize the basics of the atomic chain, and discuss the most important problems concerning a micro-macro transition with temperature. In particular we emphasize the *scaling*, the *microscopic initial data*, and the description of the *microscopic oscillations*.

In the third chapter we consider *traveling waves*: These are highly symmetric solutions of the atomic chain depending on four parameters, and they result as solutions of difference-differential equations. We study the existence of traveling waves, their thermodynamic properties, and we derive schemes for their approximation.

The fourth chapter is devoted to *modulated* traveling waves, because they allow to derive macroscopic modulation equations. These modulation equations can be interpreted as the macroscopic conservation laws for *mass*, *momentum*, *wave number* and *entropy*. Afterwards we discuss the *justification problem*, which is moreover solved for a special example.

Within the fifth chapter we investigate several numerical simulations of initial value problems for the atomic chain including some RIEMANN problems. We mainly focus on the structure of the resulting microscopic oscillations, and we will identify many situations in which the microscopic oscillations can be described in terms of modulated traveling waves.

Keywords:

atomic chain, thermodynamic limit, traveling waves, modulation equations

Zusammenfassung

Diese Arbeit betrachtet einen *Mikro-Makro-Übergang* für die eindimensionale atomare Kette mit Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn, deren Dynamik durch ein nicht-lineares aber konvexes Wechselwirkungspotential und durch die NEWTONschen Bewegungsgleichungen bestimmt ist. Um einen Mikro-Makro-Übergang zu etablieren, wählen wir eine geeignete *Skalierung* und lassen die Zahl der Teilchen gegen Unendlich laufen. Dabei steht der Fall mit *Temperatur* im Vordergrund, so dass auf der makroskopischen Skala mikroskopische Oszillationen beschrieben werden müssen.

Nach einer Einführung werden im zweiten Kapitel die Grundlagen der atomaren Kette zusammengefasst, und die wesentlichen Probleme beim Mikro-Makro-Übergang mit Temperatur diskutiert. Dabei wird besonders auf die *Skalierung*, die *mikroskopischen Anfangsdaten* und die Beschreibung der *mikroskopischen Oszillationen* eingegangen.

Im dritten Kapitel werden so genannte *Traveling-Waves* betrachtet: Das sind exakte, hochgradig symmetrische Lösungen der atomaren Kette, die generisch von vier Parametern abhängen, und die durch Differenzen-Differentialgleichungen bestimmt sind. Im Einzelnen werden die *Existenz* von Traveling-Waves, ihre *thermodynamischen Eigenschaften* und ihre *Approximierbarkeit* mit analytischen Methoden untersucht.

Im vierten Kapitel werden *modulierte* Traveling-Waves betrachtet, mit deren Hilfe dann makroskopische Modulationsgleichungen abgeleitet werden. Diese Modulationsgleichungen lassen sich als die Erhaltungssätze für *Masse*, *Impuls*, *Wellenzahl* und *Entropie* interpretieren. Anschließend wird das *Rechtfertigungsproblem* diskutiert, das für einen Spezialfall auch gelöst wird.

Im fünften Kapitel werden verschiedene numerische Simulationen von Anfangswertproblemen der atomaren Kette, unter anderem RIEMANN-Probleme, ausführlich untersucht, wobei die Strukturuntersuchung der auftretenden mikroskopischen Oszillationen im Vordergrund steht. Es zeigt sich, dass die mikroskopischen Oszillationen in vielen Fällen durch modulierte Traveling-Waves beschrieben werden können.

Schlagwörter:

atomare Kette, thermodynamischer Limes, Traveling Waves, Modulationsgleichungen

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während der letzten zwei Jahre am

*Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik*¹ (WIAS)

im Rahmen des Projektes

*Micro-macro transitions of the atomic chain*².

Dieses Projekt wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft innerhalb des Schwerpunktprogramms

*Analysis, Modellierung und Simulation von Mehrskalenproblemen*³

finanziell gefördert.

Ich möchte mich bei allen bedanken, die in der einen oder anderen Weise zum Entstehen dieser Arbeit beigetragen haben:

Mehrfach und an erster Stelle ist hier Priv.-Doz. Dr. Wolfgang Dreyer zu nennen, der mich auch vor mittlerweile mehr als zwei Jahren erstmals in die Problematik von Mikro-Makro-Übergängen eingeführt und mich seitdem betreut und unterstützt hat. Wir haben in dieser Zeit viele, manchmal kontroverse, aber immer konstruktive Diskussionen geführt. Darüber hinaus vermittelte er mir eine tiefere Einsicht in die moderne Physik, insbesondere in die Thermodynamik. Ich möchte ihm für all das herzlichst danken.

Der wissenschaftliche Teil dieser Arbeit wurde, neben Wolfgang Dreyer, maßgeblich von Prof. Dr. Jürgen Sprekels und Prof. Dr. Alexander Mielke begleitet. Alexander Mielke hat durch viele Hinweise und Ratschläge die Richtung dieses Projektes entscheidend beeinflusst und mehrmals, als der Fortgang zu stocken drohte, hilfreich eingegriffen.

Daneben gab es viele anregende Diskussionen mit Kollegen, die mich auf neue Ideen brachten und mir halfen, das bisher Erreichte besser zu verstehen und einzuordnen. Ihnen allen sei hier gedankt. Ausdrücklich will ich mich bei Dr. Jerome Dornigac für die vielen fruchtbaren und angenehmen Diskussionen der letzten Monate bedanken.

Ganz herzlich möchte ich Dr. Frank Duderstadt danken, der mich nicht nur an seinen umfangreichen Kenntnissen der Mechanik und des Satzsystems \LaTeX teilhaben lies, sondern auch sonst ein gern gesuchter Gesprächspartner war.

¹<http://www.wias-berlin.de>

²gefördert unter dem Kennzeichen Sp 212/15-2

³<http://www.mathematik.uni-stuttgart.de/~mehrskalen>

Ich bedanke mich auch bei allen Kollegen vom WIAS , die entscheidend dazu beitrugen, dass ich immer gerne ins Institut kam. Stellvertretend für viele seien hier meine Kollegen aus der Forschungsgruppe *Kontinuumsmechanik* genannt. Mein besonderer Dank gilt Heike Sill, der „guten Seele“ unserer Gruppe.

Ich danke auch Andris Möller, auf dessen numerischem Code ich aufbauen konnte, und der mir dadurch einen großen Teil der Implementierung und Fehlersuche erspart hat.

Die Niederschrift dieser Arbeit in den letzten Monaten führte zu ganz eigenen Herausforderungen. Auch hier muss Wolfgang Dreyer genannt werden, der sich ohne Bitternis durch die vielen Vorab-Versionen gekämpft hat. Barbara Herrmann, Frank Duderstadt, und Jens Schmiedel haben schließlich sehr sorgfältig Korrektur gelesen und mich bei Fragen der neuen deutschen Rechtschreibung beraten. Es sei ihnen allen herzlichst gedankt.

Schließlich danke ich allen Freunden und meiner Familie, die gerade in den letzten Monaten viel Verständnis für mich aufbrachten.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
2	Die atomare Kette	7
2.1	Grundlagen	7
2.1.1	Die NEWTONschen Bewegungsgleichungen	7
2.1.2	Das Wechselwirkungspotential	8
2.1.3	Randbedingungen	9
2.1.4	Drei einfache Modelle	10
2.1.5	LAGRANGE-Mechanik der Kette	12
2.1.6	Diskrete Erhaltungsgleichungen	13
2.2	Thermodynamischer Limes	13
2.2.1	Grundlagen und Überblick	13
2.2.2	Zwei numerische Beispiele	17
2.2.2.1	Beispiel <i>B1</i> : Kalte Daten	17
2.2.2.2	Beispiel <i>B2</i> : Daten mit Temperatur	20
2.2.3	Die hyperbolische Skalierung	25
2.2.4	Allgemeine Strategie für den Mikro-Makro-Übergang	27
2.2.5	Makroskopische Erhaltungsgleichungen	28
2.2.6	Mikro-Makro-Übergang für kalte Daten	30
2.2.7	Mikroskopische Oszillationen und YOUNG-Maße	31
2.2.8	Bemerkungen zur harmonischen Kette	33
3	Traveling-Waves und ihre Thermodynamik	35
3.1	Traveling-Waves	35
3.1.1	Definition und abgeleitete Größen	35
3.1.2	Existenz von Traveling-Waves	38
3.1.2.1	Funktionalanalytisches Setting	39
3.1.2.2	Existenzresultat	40
3.1.2.3	Beweis des Existenzresultates	41
3.1.2.4	Diskussion	44
3.1.3	Beispiele	44
3.1.4	Binäre Oszillationen	47
3.2	Thermodynamik von Traveling-Waves	48

3.2.1	Übersicht	48
3.2.2	Die Parameter (r, k, γ)	49
3.2.3	Die Parameter (r, k, ω)	50
3.2.4	Die Parameter (r, k, S)	51
3.2.5	Bemerkungen	52
3.2.6	Thermodynamik der Modelle A, B und C	53
3.2.7	Thermodynamik binärer Oszillationen	54
3.3	Approximation von Traveling-Waves	56
3.3.1	Das γ -Schema	56
3.3.2	Das S -Schema und das T -Schema	59
3.3.3	Weitere Bemerkungen	60
3.3.4	Numerische Strukturanalyse für Traveling-Waves	62
3.3.5	Numerische Zustandsgleichung des TODA-Potentials	65
4	Die Modulationstheorie	
	der atomaren Kette	69
4.1	Modulierte Traveling-Waves	69
4.2	Die Modulationsgleichungen	71
4.2.1	Herleitung	71
4.2.2	Eigenschaften, Interpretation	76
4.2.3	Die Modulationsgleichungen der Modelle A, B und C	79
4.3	Rechtfertigung der Modulationsgleichungen	82
4.3.1	Allgemeiner Fall	82
4.3.2	Rechtfertigung für das Billard-Modell	85
4.3.2.1	Die mikroskopische Dynamik im EULER-Bild	85
4.3.2.2	Traveling-Waves im EULER-Bild	87
4.3.2.3	Beispiel für die mikroskopische Dynamik	88
4.3.2.4	Die Modulationsgleichungen im EULER-Bild	90
4.3.2.5	Eine Klasse von makroskopischen Lösungen	93
4.3.2.6	Modulierte Traveling-Waves im EULER-Bild	94
5	Numerische Simulationen	
	der atomaren Kette	103
5.1	Vorbemerkungen	103
5.2	Numerische Verfahren und ihre Implementierung	104
5.2.1	Der numerische Integrator	104
5.2.2	Anfangsdaten und Zeitschritte	105
5.2.3	Fenster in der LAGRANGE-Raum-Zeit	106
5.2.4	Die Traveling-Wave eines Fenster	109
5.2.5	Bezeichnungen	112
5.3	Die Klasse G : Glatte Anfangsdaten	114
5.3.1	Beispiel $G1$	114

5.3.2	Beispiel $G2$	119
5.3.3	Beispiel $G3$	125
5.3.4	Beispiel $G4$	127
5.4	Die Klasse R : RIEMANN-Probleme	129
5.4.1	Beispiel $R1$	129
5.4.2	Beispiel $R2$	134
5.4.3	Beispiel $R3$	138
6	Schlussbemerkungen und Ausblick	143
A	Systeme von Erhaltungsgleichungen	149
B	YOUNG-Maße	153

1. Einführung

Es ist ein Charakteristikum der Physik (wie auch anderer Naturwissenschaften), dass sie in viele Teildisziplinen zerfällt, deren Begrifflichkeiten und Gesetze zum Teil sehr unterschiedlich sind. Dementsprechend bedienen sie sich auch unterschiedlicher mathematischer Methoden.

So führt zum Beispiel die Klassische Mechanik auf gewöhnliche Differentialgleichungen, während die Quantenmechanik nur im Rahmen der Theorie selbstadjungierter Operatoren in HILBERT-Räumen mathematisch verstanden werden kann. Die Kontinuumsmechanik und Thermodynamik hingegen werden durch Feldtheorien beschrieben, die ihre mathematische Entsprechung in Systemen partieller Differentialgleichungen finden.

Die verschiedenen physikalischen Theorien unterscheiden sich aber nicht nur hinsichtlich ihrer Methoden, sondern auch in ihren spezifischen Anwendungsbereichen, wobei diesen in vielen Fällen verschiedene Raum- und Zeitskalen zugeordnet werden können.

So kann man etwa die Planetenbewegungen mit Hilfe der Klassischen Punktmechanik beschreiben, eben weil auf der großen Raumskala die Größe der Planeten im Vergleich zu ihrem Abstand vernachlässigbar ist. Untersucht man hingegen die Kollision zweier Himmelskörper – um vielleicht die Größe des Kraters zu berechnen, den ein auf die Erde fallender Asteroid hinterlässt – so betrachtet man eine vergleichsweise kleine Raumskala und muss daher den mathematischen Apparat der Kontinuumsmechanik benutzen.

Es gibt aber auch viele physikalische Probleme, deren innere Dynamik verschiedene Raum- und Zeitskalen umfasst. So besteht ein Festkörper, der auf der uns vertrauten Skala den Gesetzen der Thermodynamik gehorcht, aus sehr vielen Atomen, deren Bewegung auf der atomaren Skala durch die NEWTONschen Axiome beschrieben werden kann.

Es stellt sich nun die Frage, inwieweit die *makroskopische* Eigenschaften, wie zum Beispiel die Kraft-Dehnungs-Relation, aus den *mikroskopischen* Eigenschaften, hier das atomare Wechselwirkungspotential, abgeleitet werden können. Wir sprechen allgemein von einem Mikro-Makro-Übergang, falls es uns gelingt, aus den Gesetzen einer gegebenen mikroskopischen Skala die Gesetze einer makroskopischen Skala abzuleiten.

Die Problematik von Mikro-Makro-Übergängen ist sehr alt und beschäftigt die Wissenschaft seit mindestens 150 Jahren. Das Problem spitzte sich erstmals im neunzehnten Jahrhundert zu, als die bereits etablierte Klassische Mechanik um die Thermodynamik erweitert wurde. Insbesondere der zweite Hauptsatz der Thermodynamik beschäftigte die europäischen Denker, da er auf der makroskopischen Skala eine Zeitrichtung auszeichnet, wohin-

gegen die Gesetze der Klassischen Physik alle zeitreversibel sind. Da der zweite Hauptsatz in diesem Punkt den NEWTONschen Axiomen widerspricht, wurde seine Gültigkeit stark angezweifelt. Seitdem sind der *Umkehr-* und der *Wiederkehrreinwand* in die Wissenschaftsgeschichte eingegangen. Obwohl viele Fragen bis heute unbeantwortet blieben, konnten doch viele Fortschritte erzielt werden. Namentlich der probabilistische Zugang der Statistischen Physik hat sich hier als sehr fruchtbar erwiesen.

Das Interesse an Mikro-Makro-Übergängen hat in den letzten Jahrzehnten zugenommen. Die Mechaniker, Thermodynamiker und Materialwissenschaftler beschäftigen sich heute mehr denn je mit Problemen, die auf mehreren Skalen modelliert werden müssen. Hier sei nur auf die rasante Entwicklung von *Nanotechnologien* und von *neuen Materialien* verwiesen. Aber auch die Mathematiker haben nie das Interesse verloren, obwohl oder gerade weil die auftretenden Probleme mathematisch sehr anspruchsvoll sind.

Diese Arbeit ordnet sich in diese allgemeine Problematik ein und untersucht einen Mikro-Makro-Übergang für die atomare Kette, siehe Abbildung 1.1. Wir betrachten dabei ausschließlich zwei Skalen, die wir *mikroskopisch* bzw. *makroskopisch* nennen wollen.

Das mikroskopische System besteht aus endlich vielen identischen Atomen, die wir in einer (eindimensionalen) Kette anordnen. Wir nehmen an, dass jedes Atom nur mit seinen nächsten Nachbarn wechselwirkt, wobei die nichtlinearen interatomaren Kräfte durch ein konvexes Potential gegeben sind. Als dynamisches Gesetz verwenden wir dabei die NEWTONschen Bewegungsgleichungen.

Die Evolution des mikroskopischen Systems beschreiben wir in mikroskopischen Koordinaten. Das sind: die mikroskopische Zeit t und der mikroskopische Teilchenindex α .

Die makroskopische Skala wird durch eine geeignete Skalierung von Zeit und Teilchenindex eingeführt, wobei wir in dieser Arbeit ausschließlich die *hyperbolische Skalierung* verwenden: Ist N die endliche Teilchenzahl des Systems, und $\varepsilon = 1/N$, so definieren wir die makroskopische Zeit \bar{t} und den makroskopischen Teilchenindex $\bar{\alpha}$ durch

$$\bar{t} = \varepsilon t, \quad \bar{\alpha} = \varepsilon \alpha. \quad (1.0.1)$$

Der *thermodynamische Limes* resultiert, wenn die Teilchenzahl N gegen unendlich strebt. Unser Ziel ist es, die Evolutionsgleichungen abzuleiten, die im Limes $N \rightarrow \infty$ die Dynamik der atomaren Kette auf der makroskopischen Skala bestimmen. In dieser Arbeit sind wir vor allem an dem Fall mit *Temperatur* interessiert, in dem auf der makroskopischen Skala *mikroskopische Oszillationen* zu beschreiben sind.

Obwohl das mikroskopische System aus physikalischer Sicht denkbar einfach ist, werden wir mit sehr ernsten mathematischen Problemen konfrontiert sein. Der erste und wichtigste Schritt ist dabei, eine geeignete Beschreibung der mikroskopischen Oszillationen zu finden.

Das Verhalten diskreter Systeme mit sehr vielen Freiheitsgraden hat in den letzten Jahrzehnten viele Mathematiker und Physiker interessiert. Dies kann an dem Umfang der

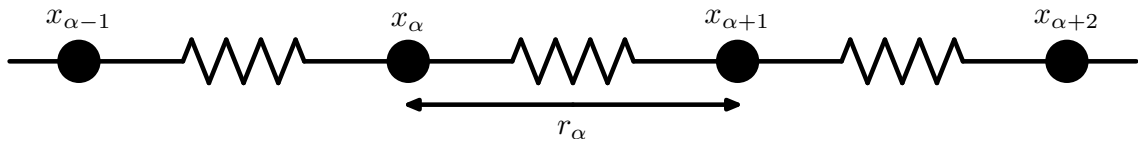


Abb. 1.1: Schematische Darstellung der atomaren Kette. \diamond

einschlägigen Literatur abgelesen werden, die mittlerweile eine große Anzahl von Aufsätzen und Monographien umfasst.

Seitdem hat man viele neue Erkenntnisse über diskrete Systeme zusammengetragen, wobei nicht nur die atomare Kette aus Abbildung 1.1 betrachtet wurde, sondern auch andere diskrete Systeme wie zum Beispiel die harmonische Kette mit nichtlinearem äußeren Potential, die diskrete nichtlineare SCHRÖDINGER-Gleichung oder auch mehrdimensionale Gittermodelle.

Am Anfang stand dabei in moderner Zeit die Bahn brechende Arbeit [FPU55] von FERMI, PASTA und ULAM, die erstmals Computer einsetzten, um numerische Simulationen durchzuführen. Sie studierten, genau wie wir, die atomare Kette – wobei sie sich auf eine kubische Nichtlinearität beschränkten – und entdeckten, dass die nichtlineare Kette fast-periodische Lösungen besitzt, wobei die Periodenlänge signifikant kürzer war, als es nach analytischen Untersuchungen zur harmonischen Kette zu erwarten war. Dieses Ergebnis war überraschend, da man allgemein davon ausging, dass sich die Anfangsenergie auf Grund der Nichtlinearität sehr schnell auf die hohen Moden verteilen sollte und dadurch eine Rückkehr des Systems zu den Anfangsdaten praktisch verhindern würde. Als weiterer Meilenstein sollten sich die Arbeiten von TODA erweisen, der ein Beispiel für eine vollständig integrable atomare Kette fand ([Tod70], [Tod81]).

Da die mathematischen Eigenschaften diskreter Systeme mit vielen Freiheitsgraden sehr komplex und vielfach noch nicht vollständig verstanden sind, gab und gibt es mehrere Strategien, das Problem zu vereinfachen. Das sind unter anderem:

1. Suchen spezieller Lösungen,
2. Betrachten spezieller Anfangswertprobleme,
3. Ableiten von Kontinuums-Limites.

Spezielle Lösungen können sich dabei aus der Betrachtung spezieller Potentiale, etwa des TODA-Potentials, ergeben, oder auch zeitlich periodische Lösungen sein (siehe etwa [AG96], [RS94]). In die Klasse spezieller Lösungen fallen auch die *solitary waves*, deren Existenz für eine große Klasse atomarer Ketten erstmals von FRIESECKE und WATTIS in [FW94] bewiesen wurde, und die so genannten *Breathers*, vgl. dazu den Übersichtsartikel [FW98] von FLACH und WILLIS.

Manchmal ist es sinnvoll, ganz spezielle Anfangswertprobleme zu betrachten, um bestimmte Phänomene isoliert zu studieren. Im Kontext atomarer Ketten gibt es zum Beispiel eine Reihe von Arbeiten ([HS78], [DKV95a, DKV95b], [VDO91], [DKKZ96]), in

denen man mit einer halb-unendlichen Kette, in der alle Atome kräftefrei ruhen, startet und dann die Bahn des Randatoms vorgibt.

Ein Kontinuums-Limes beschreibt das Verhalten eines diskreten Systems approximativ unter einer gewissen Skalierung. So kann zum Beispiel die harmonische Kette mit äußerem Potential für kalte Daten und große Teilchenzahlen durch die KLEIN-GORDON-Gleichung ersetzt werden ([Pal00], [Kno00]). Aus der nichtlinearen Kette aus Abbildung 1.1 resultiert im einfachsten Fall ein nichtlineares hyperbolisches 2×2 -System, vgl. [DM98] und Abschnitt 2.2.6. In Unterkapitel 2.2 werden wir detailliert auf weitere mögliche Kontinuums-Limites der atomaren Kette eingehen.

Die namensgebende, charakteristische Eigenschaft eines jeden Kontinuums-Limes ist, dass er ein hochdimensionales System gewöhnlicher Differentialgleichungen durch einige wenige partielle Differentialgleichungen approximiert.

Der thermodynamische Limes, der in dieser Arbeit betrachtet wird, ist in diesem Sinne nur ein Kontinuums-Limes unter vielen anderen, der allerdings Temperatur in Form von mikroskopischen Oszillationen beinhaltet. Ein wesentliches Hilfsmittel in unserem Mikro-Makro-Übergang werden die so genannten *Traveling-Waves* sein. Diese sind spezielle, hochgradig symmetrische Lösungen der atomaren Kette, die generisch von vier Parametern abhängen, und die als Lösungen von Differenzen-Differentialgleichungen bestimmt werden können.

Wir beschreiben schließlich den Aufbau dieser Arbeit:

Kapitel 2 ist den Grundlagen gewidmet, d.h. wir stellen die wichtigsten Eigenschaften der atomaren Kette zusammen. Außerdem diskutieren wir unsere allgemeine Strategie für den Mikro-Makro-Übergang, wobei wir besonders auf die *Skalierung*, die *mikroskopischen Anfangsdaten* und die *makroskopischen Erhaltungsgleichungen* eingehen werden.

In Kapitel 3 studieren wir Traveling-Waves in der atomaren Kette, wobei wir uns auf diejenigen Traveling-Waves konzentrieren, die auf der makroskopischen Skala zu Temperatur führen. Im Einzelnen untersuchen wir die Existenz von Traveling-Waves, ihre thermodynamischen Eigenschaften sowie ihre Approximierbarkeit.

In Kapitel 4 wenden wir die *Modulationstheorie*, die ursprünglich für partielle Differentialgleichungen entwickelt wurde, auf die atomare Kette an. Der wesentliche Schritt ist dabei der Übergang zu approximativen Lösungen des mikroskopischen Systems, die dadurch konstruiert werden, dass die Traveling-Wave-Parameter auf der makroskopischen Skala *moduliert* werden.

Da die mikroskopischen Oszillationen in einer Traveling-Wave mit Temperatur starken Restriktionen genügen, wird es gelingen, zumindest formal einen thermodynamischen Limes der atomaren Kette zu etablieren. Dabei werden wir vier partielle Differentialgleichungen in Form von makroskopischen Erhaltungsgleichungen ableiten.

Schließlich diskutieren wir in Kapitel 4 das *Rechtfertigungsproblem*, das wir auch in einem Spezialfall zufriedenstellend lösen können.

In Kapitel 5 studieren wir mehrere numerische Simulationen, die starke Indizien dafür liefern, dass unsere formale Ableitung aus Kapitel 4 korrekt war, und wir deshalb in vielen Fällen davon ausgehen können, dass die mikroskopischen Oszillationen in der atomaren Kette in der Tat durch modulierte Traveling-Waves gegeben sind. Außerdem werden wir sehen, dass unser Verständnis von Temperatur generisch für die atomare Kette ist, da diese aus kalten Anfangsdaten von selbst Oszillationen in Form von modulierten Traveling-Waves produziert. Allerdings werden wir auch Situationen identifizieren, in denen die mikroskopischen Oszillationen eine so komplexe Struktur aufweisen, dass eine Beschreibung durch modulierte Traveling-Waves nicht mehr möglich ist.

2. Die atomare Kette

2.1 Grundlagen

In diesem Unterkapitel fassen wir die wichtigsten Eigenschaften der atomaren Kette zusammen. Wir beginnen dabei mit den Bewegungsgleichungen, dem Wechselwirkungspotential und den Randbedingungen. In Abschnitt 2.1.4 stellen wir drei Modellbeispiele vor, auf die wir später immer wieder Bezug nehmen werden. Schließlich betrachten wir in 2.1.5 und 2.1.6 die LAGRANGE-Mechanik der Kette sowie die diskreten Erhaltungsgleichungen.

2.1.1 Die NEWTONschen Bewegungsgleichungen

Die atomare Kette, siehe Abbildung 1.1, besteht aus identischen Teilchen mit Masse 1, die alle auf der reellen Achse angeordnet sind. Im Folgenden werden wir die Teilchen stets mit α nummerieren. Dabei kann die Anzahl der Teilchen endlich, d.h. $\alpha \in \{1, \dots, N\}$ mit $N < \infty$, oder unendlich, d.h. $\alpha \in \mathbb{Z}$, sein. Für jedes α sei

$$x_\alpha(t) \quad \text{bzw.} \quad v_\alpha(t) = \dot{x}_\alpha(t) \quad (2.1.1)$$

die aktuelle Position bzw. Geschwindigkeit des Teilchens α zum Zeitpunkt t . Außerdem bezeichnen wir mit $r_\alpha(t)$ den Abstand des Teilchens α zu seinem rechtsseitigen Nachbarn, d.h.

$$r_\alpha(t) := x_{\alpha+1}(t) - x_\alpha(t). \quad (2.1.2)$$

Wir nehmen an, dass jedes Teilchen nur mit seinen *nächsten Nachbarn* wechselwirkt, und modellieren die interatomaren Kräfte durch ein Wechselwirkungspotential Φ . Insbesondere betrachten wir keine äußeren Kräfte. Die Dynamik der atomaren Kette wird durch die NEWTONschen Bewegungsgleichungen beschrieben. Es gilt also

$$\ddot{x}_\alpha(t) = \Phi'(x_{\alpha+1}(t) - x_\alpha(t)) - \Phi'(x_\alpha(t) - x_{\alpha-1}(t)). \quad (2.1.3)$$

Die Gleichungen (2.1.3) können wir auch als System erster Ordnung wie folgt schreiben

$$\begin{aligned} \dot{r}_\alpha(t) &= v_{\alpha+1}(t) - v_\alpha(t), \\ \dot{v}_\alpha(t) &= \Phi'(r_\alpha(t)) - \Phi'(r_{\alpha-1}(t)). \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

2.1.2 Das Wechselwirkungspotential

Aus Gründen der Anschauung betrachtet man meistens atomare Wechselwirkungspotentiale Φ , die sicherstellen, dass alle Atomabstände stets positiv sind. Dazu muss das Potential beim Abstand $r = 0$ unendlich stark abstoßend sein, d.h.

$$\lim_{r \downarrow 0} \Phi(r) = +\infty. \quad (2.1.5)$$

Aus mathematischen Gründen ist diese Einschränkung aber weder erforderlich noch besonders hilfreich, und daher wollen wir auf sie verzichten. Deshalb kann der Abstand benachbarter Atome auch negativ werden.

Wir werden uns im Rahmen dieser Arbeit fast immer auf konvexe Wechselwirkungspotentiale beschränken, die darüber hinaus nach unten beschränkt sind. Sofern wir nicht ausdrücklich davon abweichen, wollen wir im Folgenden stets stillschweigend voraussetzen, dass Φ der Annahme 2.1.1 genügt.

Annahme 2.1.1 *Im Definitionsbereich von Φ gilt:*

1. Φ ist \mathcal{C}^1 -glatt und stückweise \mathcal{C}^2 .
2. Φ ist konvex, d.h. $\Phi'' \geq 0$.
3. Φ ist nichtnegativ, d.h. $\Phi \geq 0$.

Um im weiteren Verlauf gegebenenfalls einige Argumente zu vereinfachen, formulieren wir die folgende Verschärfung von 2.1.1, die wir aber nicht stillschweigend voraussetzen werden.

Annahme 2.1.2

1. Φ ist \mathcal{C}^2 und ist auf der gesamten reellen Achse definiert.
2. Es existieren zwei Konstanten m und M , so dass

$$0 < m \leq \Phi'' \leq M < \infty. \quad (2.1.6)$$

Ein prominentes Beispiel für ein nichtlineares konvexes Wechselwirkungspotential ist das TODA-Potential

$$\Phi(r) = \frac{a}{b} \exp(b(1-r)) - a(1-r), \quad (2.1.7)$$

wobei a und b zwei positive Konstanten sind. Das TODA-Potential wird sehr oft als Wechselwirkungspotential angenommen, da mit ihm die NEWTONschen Bewegungsgleichungen vollständig integrabel sind, vgl. etwa [Tod70], [DKKZ74], [Hén74], [Tod81], [VDO91], [DKKZ96], [DM98]. Auch wir werden häufig das TODA-Potential mit $a = b = 1$ verwenden, ohne allerdings von seiner vollständigen Integrierbarkeit Gebrauch zu machen.

In Abschnitt 2.1.4 werden wir drei weitere atomare Wechselwirkungspotentiale beschreiben.

2.1.3 Randbedingungen

Die NEWTONschen Bewegungsgleichungen (2.1.3) bzw. (2.1.4) müssen für eine endliche Teilchenzahl $N < \infty$ durch geeignete Randbedingungen ergänzt werden. Wir stellen nun die wichtigsten Randbedingungen vor.

Eine wichtige Klasse atomarer Ketten sind Lösungen der NEWTONschen Bewegungsgleichungen, die periodisch bezüglich des Teilchenindex α sind. Die Teilchenzahl N ist in diesem Fall nichts anderes als die Periodenlänge. Dabei meint Periodizität nicht, dass die Positionen der Teilchen periodisch sind, sondern dass sowohl die Abstände und als auch die Geschwindigkeiten periodisch sind. Mit anderen Worten:

$$r_{\alpha+N}(t) = r_{\alpha}(t), \quad v_{\alpha+N}(t) = v_{\alpha}(t). \quad (2.1.8)$$

Für die atomaren Positionen ergibt sich damit die Gleichung

$$x_{\alpha+N}(t) = L + x_{\alpha}(t), \quad (2.1.9)$$

wobei L eine zeitunabhängige Konstante ist, deren Wert durch Anfangsdaten festgelegt wird.

In einer periodischen Kette sind die N Abstände $r_1(t) \dots r_N(t)$ und die N Geschwindigkeiten $v_1(t) \dots v_N(t)$ die unabhängigen Größen, deren Dynamik durch das System (2.1.4) gegeben ist. Die Periodizitätsbedingung (2.1.8) reduziert sich zur

Randbedingung PR:

$$r_0(t) = r_N(t), \quad v_{N+1}(t) = v_1(t). \quad (2.1.10)$$

Die periodischen Randbedingungen lassen sich auch wie folgt interpretieren: Wir stellen uns vor, die N Atome liegen auf einem Kreis der Länge L und wechselwirken mit ihren jeweiligen Nachbarn. Dann wird unmittelbar klar, dass dieses System physikalisch abgeschlossen ist, d.h. es gibt keine zeitliche Änderung des Gesamtimpulses und der Gesamtenergie. Aus diesem Grund werden wir sehr oft periodische Randbedingungen betrachten.

Eine weitere Möglichkeit, Randbedingungen vorzuschreiben, besteht darin, die Positionen der äußeren Teilchen in der Kette durch zwei explizite Zeitfunktionen $x_{\text{li}}(t)$ und $x_{\text{re}}(t)$ zu fixieren. Wir wollen die äußeren Teilchen durch die Indizes 0 und $N+1$ bezeichnen, so dass N in diesem Fall die Zahl der freien, d.h. nicht fixierten Atome ist. Es ergibt sich die

Randbedingung FA:

$$x_0(t) = x_{\text{li}}(t), \quad x_{N+1}(t) = x_{\text{re}}(t). \quad (2.1.11)$$

Obwohl diese Randbedingung physikalisch sehr plausibel ist, werden wir sie nicht verwenden und haben sie nur aus Gründen der Vollständigkeit mit angegeben.

Wir werden nun eine dritte Randbedingung vorstellen, die auf den ersten Blick sehr künstlich aussieht, die es uns aber im Kapitel 5 erlauben wird, makroskopische RIEMANN-Probleme zu betrachten. Für eine (kleine) natürliche Zahl β definieren wir die

Randbedingung β -KF:

$$r_0(t) = r_\beta(t), \quad v_{N+1}(t) = v_{N+1-\beta}(t). \quad (2.1.12)$$

Mit dieser Randbedingung bilden die NEWTONschen Gleichungen (2.1.4) ein abgeschlossenes System, das die Dynamik der N Abstände $r_1(t) \dots r_N(t)$ und der N Geschwindigkeiten $v_1(t) \dots v_N(t)$ vollständig bestimmt.

2.1.4 Drei einfache Modelle

Im weiteren Verlauf dieser Arbeit werden sich viele Fragestellungen und Probleme ergeben, die wir für allgemeine Wechselwirkungspotentiale Φ nicht beantworten bzw. lösen können. In diesen Fällen werden wir uns auf drei Modellbeispiele zurückziehen, die wir nun vorstellen wollen.

Modell A: Die Harmonische Kette

Ein sehr wichtiges Modellbeispiel ist die harmonische Kette, für die das Wechselwirkungspotential Φ quadratisch ist, d.h.

$$\Phi(r) = \frac{c_0^2}{2} r^2, \quad (2.1.13)$$

wobei $c_0 > 0$ eine gegebene Konstante ist. Die harmonische Kette besitzt den großen Vorteil, dass die NEWTONschen Bewegungsgleichungen linear werden, d.h. aus (2.1.3) wird

$$\ddot{x}_\alpha(t) = c_0^2(x_{\alpha+1}(t) - 2x_\alpha(t) - x_{\alpha-1}(t)). \quad (2.1.14)$$

Modell B: Das Billard-Modell

Für das Billard-Modell nehmen wir an, dass die Atome harte Teilchen mit Durchmesser r_0 sind, die nur durch elastische Stöße miteinander wechselwirken. Diese Art der Interaktion kann formal durch das Wechselwirkungspotential

$$\Phi(r) = \begin{cases} \infty & \text{für } r < r_0, \\ 0 & \text{für } r \geq r_0 \end{cases} \quad (2.1.15)$$

beschrieben werden, wobei wir $r_0 \geq 0$ annehmen. Obwohl das Potential (2.1.15) nicht differenzierbar ist, und somit die Gleichung (2.1.3) zunächst keinen Sinn besitzt, kann die Dynamik einer solchen Kette sehr einfach charakterisiert werden. Das Potential (2.1.15) stellt sicher, dass alle Abstände $r_\alpha(t)$ für alle Zeiten größer gleich r_0 sind. Ein einzelnes Teilchen folgt dabei seiner beschleunigungsfreien Freiflugbahn, solange die Abstände zu

seinen Nachbarn größer als r_0 sind. Erreicht ein Abstand r_α den Wert r_0 , so vertauschen die beiden Atome α und $\alpha + 1$ ihre Geschwindigkeiten und bewegen sich danach wieder auf Freiflughbahnen.

Das Modell B wird in der Literatur häufig als ein Spielmodell der nichtlinearen atomaren Kette betrachtet, vgl. etwa [Jep65], [BDS83] und [Spo91], weil die entsprechende Dynamik auch für Systeme mit vielen Teilchen sehr einfach zu beschreiben ist. Wir werden darauf im Abschnitt 4.3.2 zurückkommen.

Modell C: Kollisionen im harmonischen Potential

Das dritte Modell kombiniert gewisse Eigenschaften der ersten beiden. Wie im Modell B nehmen wir an, dass zwischen zwei benachbarten Teilchen keine Wechselwirkung besteht, solange ihr Abstand größer als ein *Wechselwirkungsabstand* $r_0 \geq 0$ ist. Für Abstände $r \leq r_0$ modellieren wir die atomare Wechselwirkung durch ein harmonisches Potential. Insgesamt setzen wir

$$\Phi(r) = \begin{cases} \frac{\delta^2}{4}(r - r_0)^2 & \text{für } r \leq r_0, \\ 0 & \text{für } r \geq r_0, \end{cases} \quad (2.1.16)$$

wobei $\delta > 0$ eine Konstante ist.

Die wesentlichen Eigenschaften dieses Potentials können im *Elementar-Problem* studiert werden. Dazu betrachten wir zwei einzelne Teilchen mit den Positionen $x_1(t)$ und $x_2(t)$, die zum Zeitpunkt $t = 0$ einen Abstand größer r_0 besitzen, und die sich zunächst einander annähern. Es gilt also

$$x_2(0) - x_1(0) > r_0 \quad \text{und} \quad \dot{x}_2(0) - \dot{x}_1(0) < 0. \quad (2.1.17)$$

Die entsprechende Bewegungsgleichung lautet

$$\ddot{x}_2(t) = +\Phi'(r(t)), \quad \ddot{x}_1(t) = -\Phi'(r(t)), \quad (2.1.18)$$

wobei $r(t) = x_2(t) - x_1(t)$ den Abstand der beiden Teilchen bezeichnet. Es gilt nun

$$\ddot{r}(t) = \begin{cases} \delta^2(r(t) - r_0) & \text{falls } r(t) \leq r_0, \\ 0 & \text{falls } r(t) \geq r_0. \end{cases} \quad (2.1.19)$$

Die Elementar-Kollision kann wie folgt beschrieben werden: Die beiden Teilchen bewegen sich im freien Flug solange aufeinander zu, bis ihr Abstand den Wert r_0 erreicht. Danach bleiben beide Teilchen für einen Zeitraum der Länge $t_{\text{koll}} = \pi/\delta$ miteinander in Kontakt, d.h. solange gilt $r < r_0$. Am Ende der Kollision haben beide Teilchen ihre Geschwindigkeit getauscht, so dass sie sich im freien Flug voneinander entfernen.

Die Modelle B und C sind in vielen Aspekten sehr ähnlich. Es gibt jedoch zwei wesentliche Unterschiede:

1. Die zwei kollidierenden Teilchen im Elementar-Problem tauschen in Modell B instantan ihre Geschwindigkeit, wohingegen sie in Modell C dazu die Zeit π/δ benötigen.
2. Für Systeme mit vielen Teilchen gibt es im Modell C innere potentielle Energie, während im Modell B die gesamte innere Energie rein kinetisch ist.

2.1.5 LAGRANGE-Mechanik der Kette

In diesem Abschnitt fassen wir die LAGRANGE-Mechanik der atomaren Kette zusammen, da diese eine wesentliche Rolle in den Kapiteln 3 und 4 spielen wird. Dazu betrachten wir eine endliche Kette mit periodischen Randbedingungen. Die atomaren Positionen, Abstände und Geschwindigkeiten fassen wir zu drei N -dimensionalen, zeitabhängigen Vektoren $X(t)$, $R(t)$ bzw. $V(t)$ zusammen, d.h.

$$(X(t))_\alpha = x_\alpha(t), \quad (R(t))_\alpha = r_\alpha(t), \quad (V(t))_\alpha = v_\alpha(t). \quad (2.1.20)$$

Zunächst definieren wir zwei Funktionale \mathcal{K} und \mathcal{W} , die unmittelbar als die *mittlere kinetische Energie* und die *mittlere potentielle Energie* interpretiert werden können. Wir setzen

$$\mathcal{K}(V) = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{2} V_\alpha^2, \quad (2.1.21)$$

$$\mathcal{W}(R) = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \Phi(R_\alpha). \quad (2.1.22)$$

Die *mittlere Gesamtenergie* \mathcal{E} und die *mittlere Wirkung* \mathcal{L} ergeben sich aus

$$\mathcal{E}(V, R) = \mathcal{K}(V) + \mathcal{W}(R), \quad (2.1.23)$$

$$\mathcal{L}(V, R) = \mathcal{K}(V) - \mathcal{W}(R). \quad (2.1.24)$$

Für ein festes Zeitintervall $[0, t_{\text{end}}]$ ist das entsprechend normierte *Wirkungsintegral* gegeben durch

$$\mathbf{L} = \frac{1}{t_{\text{end}}} \int_0^{t_{\text{end}}} \mathcal{L}(\dot{X}(t), \nabla_+ X(t)) \, dt. \quad (2.1.25)$$

Dabei ist ∇_+ der rechtsseitige Differenzenoperator, d.h.

$$(\nabla_+ X)_\alpha = X_{\alpha+1} - X_\alpha. \quad (2.1.26)$$

Die Bewegungsgleichungen (2.1.3) können über das *Prinzip der kleinsten Wirkung* abgeleitet werden, welches besagt, dass die Dynamik der atomaren Kette das Wirkungsintegral minimiert, d.h. die NEWTONschen Bewegungsgleichungen sind gerade die entsprechenden EULER-LAGRANGE-Gleichungen. Das System (2.1.3) ist also äquivalent zu

$$\frac{d}{dt} \partial_V \mathcal{L}(\dot{X}(t), \nabla_+ X(t)) + \nabla_- \partial_R \mathcal{L}(\dot{X}(t), \nabla_+ X(t)) = 0, \quad (2.1.27)$$

wobei ∇_- der linksseitige Differenzenoperator ist. Schließlich gibt es eine HAMILTON-Funktion \mathcal{H} der atomaren Kette, die durch die (ungemittelte) Gesamtenergie gegeben ist, d.h.

$$\mathcal{H}(\dot{X}, X) = N \mathcal{E}(\dot{X}, \nabla_+ X). \quad (2.1.28)$$

Die Bewegungsgleichungen (2.1.3) können nun auch wie folgt geschrieben werden

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} X(t) &= +\partial_{\dot{X}} \mathcal{H}(X(t), \dot{X}(t)), \\ \frac{d}{dt} \dot{X}(t) &= -\partial_X \mathcal{H}(X(t), \dot{X}(t)). \end{aligned} \quad (2.1.29)$$

2.1.6 Diskrete Erhaltungsgleichungen

In Abschnitt 2.2 werden wir den thermodynamischen Limes der atomaren Kette untersuchen, der das Verhalten des diskreten Systems (2.1.3) im Limes $N \rightarrow \infty$ beschreibt. Wie wir sehen werden, spielen dabei makroskopische Erhaltungssätze eine wesentliche Rolle. In der klassischen Mechanik gibt es bekanntlich drei fundamentale Größen, für die ein Erhaltungssatz gilt: die Masse, der Impuls und die Energie. Wir wollen nun für die atomare Kette die entsprechenden Erhaltungssätze in lokaler Form, d.h. als Bilanzgleichungen ohne Produktion, ableiten.

Die Gleichungen (2.1.4) schreiben wir als

$$\dot{r}_\alpha(t) - \nabla_+ v_\alpha(t) = 0, \quad (2.1.30)$$

$$\dot{v}_\alpha(t) - \nabla_- \Phi'(r_\alpha(t)) = 0, \quad (2.1.31)$$

und haben damit bereits die Erhaltungsgleichungen für Masse und Impuls identifiziert. Um schließlich die Energiebilanz ableiten zu können, definieren wir die *diskrete Energiedichte* $e_\alpha(t)$ und den *diskreten Energiefluss* $f_\alpha(t)$ durch

$$\begin{aligned} e_\alpha(t) &:= \frac{1}{2} v_{\alpha+1}(t)^2 + \Phi(r_\alpha(t)), \\ f_\alpha(t) &:= -\Phi'(r_\alpha(t)) v_\alpha(t). \end{aligned} \quad (2.1.32)$$

Mit diesen Bezeichnungen folgt

$$\dot{e}_\alpha(t) + \nabla_+ f_\alpha(t) = 0. \quad (2.1.33)$$

Wir merken an, dass es verschiedene Möglichkeiten gibt, die diskrete Energiedichte und den diskreten Energiefluss zu definieren. Im thermodynamischen Limes sind aber alle Definitionen äquivalent.

Aus den lokalen Erhaltungssätzen (2.1.30)–(2.1.33) folgen unmittelbar die drei entsprechenden globalen Erhaltungssätze, sofern wir periodische Randbedingungen annehmen. Dann gilt

$$\frac{d}{dt} \sum_{\alpha=1}^N r_\alpha(t) = 0, \quad (2.1.34)$$

$$\frac{d}{dt} \sum_{\alpha=1}^N v_\alpha(t) = 0, \quad (2.1.35)$$

$$\frac{d}{dt} \sum_{\alpha=1}^N \left(\frac{1}{2} v_\alpha(t)^2 + \Phi(r_\alpha(t)) \right) = 0. \quad (2.1.36)$$

2.2 Thermodynamischer Limes

2.2.1 Grundlagen und Überblick

Wir wollen folgende Sprechweise vereinbaren, die sich bei der Niederschrift dieser Arbeit als zweckmäßig erwiesen hat: Jede Lösung von (2.1.3) bzw. (2.1.4) wollen wir *eine atomare*

Kette nennen. Wenn wir jedoch den bestimmten Artikel gebrauchen, *die atomare Kette*, so meinen wir in aller Regel das physikalische System als solches. Im weiteren Verlauf wird außerdem immer aus dem Kontext heraus klar sein, was genau wir mit *atomarer Kette* meinen.

Der *thermodynamische Limes* für die atomare Kette resultiert, wenn wir den Skalierungsparameter

$$\varepsilon := 1/N \tag{2.2.1}$$

formal gegen Null streben lassen. Das bedeutet, dass wir atomare Ketten (also Lösungen der NEWTONschen Bewegungsgleichungen) mit immer größer werdenden Teilchenzahlen miteinander vergleichen, und in irgendeinem Sinne von Grenzwert reden wollen. Die Etablierung des thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ nennen wir den *Mikro-Makro-Übergang*.

Wir wollen uns in diesem Unterkapitel auf endliche Teilchenzahlen $N < \infty$ beschränken und immer periodische Randbedingungen annehmen. Wir weisen jedoch darauf hin, dass alle Betrachtungen leicht auf unendliche Ketten übertragen werden können, sofern die „Teilchenzahl“ N dann als die Anzahl derjenigen Teilchen interpretiert wird, die auf das makroskopische Einheitsintervall abgebildet werden (siehe unten).

Im diesem Unterkapitel wollen wir nun sukzessive beschreiben, wie wir beim Mikro-Makro-Übergang vorgehen, und mit welchen Problemen wir dabei konfrontiert sind. In diesem Abschnitt beginnen wir mit einer ersten, nur einführenden, Diskussion der folgenden Teilprobleme:

1. Wahl der Skalierung,
2. EULER-Bild versus LAGRANGE-Bild,
3. mikroskopische Oszillationen, und
4. mikroskopische Anfangsdaten.

Im Abschnitt 2.2.2 präsentieren wir zwei numerische Simulationen, um den Leser exemplarisch in die allgemeine Problematik einzuführen. In Abschnitt 2.2.3 werden wir genauer auf die hyperbolische Skalierung eingehen, die wir in dieser Arbeit ausschließlich verwenden werden. In 2.2.4 beschreiben wir den allgemeinen mathematischen Rahmen für den Mikro-Makro-Übergang, wobei in 2.2.5 die makroskopischen Erhaltungsgleichungen eine wichtige Rolle spielen werden. Schließlich werden wir in Abschnitt 2.2.6 den Mikro-Makro-Übergang für kalte Daten etablieren und in 2.2.7 einige Vorarbeiten für den Fall nicht-kalter Daten leisten.

Im ersten Schritt des Mikro-Makro-Übergangs müssen wir festlegen, wie wir atomare Ketten unterschiedlicher Teilchenzahl miteinander vergleichen. Im mathematischen Kontext heißt das, wir wählen eine bestimmte *Skalierung*. Dazu legen wir für jede physikalische Größe

von Interesse fest, wie diese in Abhängigkeit von ε skaliert, d.h. vergrößert oder verkleinert werden soll.

Aus nahe liegenden Gründen sollten wir auf jeden Fall den Teilchenindex skalieren, aber auch die Zeit und der Ort müssen im Allgemeinen mitskaliert werden. Um eine klare Unterscheidung zwischen skalierten und unskalierten atomaren Größen zu haben, nennen wir die ersteren *makroskopisch* und die letzteren *mikroskopisch*. Es gibt mehrere sinnvolle Skalierungen, und wir besitzen zunächst die Freiheit, eine auszuwählen. Allerdings bestimmt die Skalierung, wie der thermodynamische Limes aussieht, und welche Phänomene wir dort beobachten können.

Wir wollen die makroskopische Zeit mit \bar{t} , den makroskopischen Teilchenindex mit $\bar{\alpha}$ und die makroskopische Position mit \bar{x} bezeichnen. Wir verwenden ausschließlich die *hyperbolische Skalierung*, d.h. wir setzen

$$\bar{t} = \varepsilon t, \quad \bar{\alpha} = \varepsilon \alpha, \quad \bar{x} = \varepsilon x. \quad (2.2.2)$$

Des Weiteren wollen wir vereinbaren, dass alle anderen Größen, insbesondere die atomaren Abstände, Geschwindigkeiten und Energien, *nicht* skaliert werden. Wir werden sehen, dass – mit dieser Skalierung – die Dynamik der Kette im thermodynamischen Limes durch *hyperbolische* partielle Differentialgleichungen beschrieben wird.

Andere Arbeiten, die auch die hyperbolische Skalierung verwenden, sind zum Beispiel [DM98], [DK00], [DH02] und [Mie04] für die atomare Kette, oder [HLM94] für ein anderes System, nämlich die diskrete nichtlineare SCHRÖDINGER-Gleichung.

Wir können nun atomare Ketten mit verschiedenen Teilchenzahlen dadurch miteinander vergleichen, dass wir auf die makroskopische Skala wechseln. Konkret heißt das, wir untersuchen, wie die Lösungen von (2.1.3) von der makroskopischen Zeit \bar{t} und dem makroskopischen Teilchenindex $\bar{\alpha}$ abhängen.

Indem wir \bar{t} und $\bar{\alpha}$ als makroskopische Koordinaten wählen, haben wir festgelegt, dass wir den Mikro-Makro-Übergang im LAGRANGE-Bild durchführen wollen, denn im thermodynamischen Limes ist $\bar{\alpha}$ gerade die makroskopische materielle Koordinate (LAGRANGE-Ort). Alternativ kann man, wie zum Beispiel DREYER und KUNIK in [DK00], den thermodynamischen Limes auch im EULER-Bild etablieren, indem man \bar{t} und \bar{x} als makroskopische Koordinaten wählt. Da aber der Teilchenindex α schon die mikroskopische materielle Koordinate ist, ist das LAGRANGE-Bild der natürliche Kandidat für den Mikro-Makro-Übergang. In Unterkapitel 4.3 werden wir allerdings sehen, dass manchmal auch dem EULER-Bild der Vorzug zu geben ist.

Im weiteren Verlauf müssen wir prinzipiell zwischen folgenden zwei Fällen unterscheiden:

1. Die atomaren Daten ändern sich nur auf der makroskopischen Skala.
2. Die atomaren Daten ändern sich auf der mikroskopischen Skala.

Im ersten Fall sprechen wir von *kalten Daten*, während wir im zweiten Fall sagen, die atomaren Daten besitzen *Temperatur*. Diese Sprechweise ist physikalisch motiviert, denn im zweiten Fall müssen wir auf der makroskopischen Skala *mikroskopische Oszillationen* beschreiben. Wie wir sehen werden, ist die mathematisch korrekte Beschreibung dieser Oszillationen der schwierigste Teil im Rahmen von Mikro-Makro-Übergängen. Im Falle kalter Daten gibt es keine solche mikroskopischen Oszillationen, und die Etablierung des thermodynamischen Limes wird dadurch wesentlich einfacher, vgl. dazu Abschnitt 2.2.6.

Wir sind in dieser Arbeit vor allem an Anfangswertproblemen für die atomare Kette interessiert. Daher stellt sich die Frage, wie man für festes N die Anfangsdaten wählen muss, damit man im Limes $N \rightarrow \infty$ erwarten kann, dass die Lösungen der NEWTONschen Bewegungsgleichungen überhaupt in irgendeinem Sinne konvergieren. Eine minimale Forderung ist sicherlich, dass für $N \rightarrow \infty$ die skalierten Anfangsdaten in irgendeinem Sinne konvergieren. Andererseits müssen die Anfangsdaten auch zur gewählten Zeitskala „passen“. Wir werden im weiteren Verlauf dieser Arbeit eine Klasse von Anfangsdaten identifizieren, für die wir Konvergenz zwar nicht beweisen, aber doch erwarten können.

Abschließend stellen wir nun Beispiele für andere Skalierungen zusammen, die in der Vergangenheit für die atomare Kette verwendet wurden.

SCHNEIDER und WAYNE machen in [SW00] den folgenden Ansatz für die atomaren Abstände in einer unendlichen Kette:

$$r_\alpha(t) = \varepsilon^2 R(\varepsilon^3 t, \varepsilon(\alpha + ct)) + \mathcal{O}(\varepsilon^4), \quad (2.2.3)$$

wobei c eine Konstante ist. In unserer Notation entspricht das der Skalierung

$$\bar{t} = \varepsilon^3 t, \quad \bar{\alpha} = \varepsilon(\alpha + ct), \quad \bar{x} = \frac{1}{\varepsilon} x. \quad (2.2.4)$$

Für die atomaren Positionen bzw. Geschwindigkeiten folgt aus (2.2.3), dass in führender Ordnung gilt:

$$\begin{aligned} x_\alpha(t) &= \varepsilon X(\varepsilon^3 t, \varepsilon(\alpha + ct)), & R(\bar{t}, \bar{\alpha}) &= \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} X(\bar{t}, \bar{\alpha}), \\ v_\alpha(t) &= \varepsilon^2 R(\varepsilon^3 t, \varepsilon(\alpha + ct)). \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

In [SW00] gelingt es, für R im Kontinuums-Limes die KORTEWEG-DE VRIES-Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \bar{t}} R(\bar{t}, \bar{\alpha}) &= \frac{\Phi'''(0)}{4\sqrt{\Phi''(0)}} \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} (R^2(\bar{t}, \bar{\alpha})) + \\ &= \frac{\sqrt{\Phi''(0)}}{24} \frac{\partial^3}{\partial \bar{\alpha}^3} R(\bar{t}, \bar{\alpha}) \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

abzuleiten. Insbesondere liefert der Ansatz (2.2.3) approximative Lösungen der Ordnung $\mathcal{O}(\varepsilon^8)$, sofern der Term $\mathcal{O}(\varepsilon^4)$ geeignet gewählt wird. Unter Verwendung derselben Skalierung haben FRIESECKE und PEGO in [FP99] die Existenz solitonartiger Lösungen von (2.1.3) bewiesen.

Eine dritte Skalierung verwenden MIELKE und GIANNOULIS in [GM04b, GM04a]. Sie starten mit folgendem Ansatz für die Positionen in einer atomaren Kette mit äußerem Potential Φ_{ext} :

$$x_\alpha(t) = \varepsilon A(\varepsilon^2 t, \varepsilon(\alpha - ct)) \exp(i(\omega(k)t + k\alpha)) + cc. \quad (2.2.7)$$

Hierbei gilt: k ist fest, die Amplitude A darf komplex sein, und „cc“ steht für „komplex konjugiert“. Außerdem ist

$$\omega^2(k) = 2\Phi''(0)(1 - \cos k) + \Phi''_{\text{ext}}(0). \quad (2.2.8)$$

Insgesamt entspricht das der Skalierung

$$\bar{t} = \varepsilon^2 t, \quad \bar{\alpha} = \varepsilon(\alpha + ct), \quad \bar{x} = \frac{1}{\varepsilon} x. \quad (2.2.9)$$

Im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ wird die Evolution der Amplitude durch die nichtlineare SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i \frac{\partial}{\partial \bar{t}} A(\bar{t}, \bar{\alpha}) = \frac{\omega''(k)}{2} \frac{\partial^2}{\partial \bar{\alpha}^2} A(\bar{t}, \bar{\alpha}) + (\varrho |A|^2 A)(\bar{t}, \bar{\alpha}) \quad (2.2.10)$$

beschrieben, wobei ϱ eine Konstante ist.

2.2.2 Zwei numerische Beispiele

In diesem Abschnitt präsentieren wir zwei numerische Simulationen, um in den folgenden Abschnitten illustrative Beispiele zur Hand zu haben. Auf die zu Grunde liegenden numerischen Verfahren und ihre Implementierung werden wir später im Kapitel 5 ausführlich eingehen. In beiden Beispielen werden wir die Lösungen von Anfangswertproblemen mit verschiedenen Teilchenzahlen betrachten, wobei die atomaren Wechselwirkungen durch das TODA-Potential (2.1.7) gegeben sind. Außerdem haben wir periodische Randbedingungen gewählt.

Wir weisen darauf hin, dass wir in dieser Arbeit ausschließlich die angelsächsische Notation für Dezimalzahlen verwenden. Darüber hinaus haben wir alle numerisch berechneten Werte in der Regel auf zwei Nachkommastellen gerundet.

2.2.2.1 Beispiel B1: Kalte Daten

Im ersten Beispiel initialisieren wir die atomare Kette mit kalten Anfangsdaten. Dazu wählen wir zwei Funktionen r_{ini} und v_{ini} , die vom makroskopischen Teilchenindex $\bar{\alpha} \in [0, 1]$ abhängen. Wir wollen voraussetzen, dass beide Funktionen sich zu glatten und 1-periodischen Funktionen fortsetzen lassen.

Sei N eine zunächst feste Teilchenzahl und sei $\varepsilon = 1/N$ der entsprechende Skalierungsparameter. Dann definieren wir die Anfangsdaten der atomaren Kette durch

$$r_\alpha(0) = r_{\text{ini}}(\varepsilon\alpha), \quad v_\alpha(0) = v_{\text{ini}}(\varepsilon\alpha). \quad (2.2.11)$$

In unserem konkreten Beispiel gilt

$$r_{\text{ini}}(\bar{\alpha}) = 0.5 \quad \text{und} \quad v_{\text{ini}}(\bar{\alpha}) = \frac{1}{2} \sin(2\pi\bar{\alpha}) + \frac{1}{2} \cos(4\pi\bar{\alpha}). \quad (2.2.12)$$

Die resultierenden Anfangsdaten haben wir für $N = 16000$ in Abbildung 2.1 dargestellt,

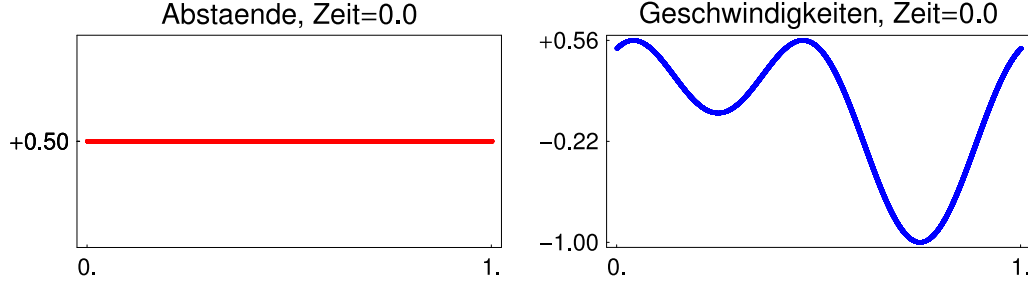


Abb. 2.1: Modulierte kalte Anfangsdaten für Beispiel *B1* über dem makroskopischen Teilchenindex. \diamond

wobei wir sowohl die Abstände als auch die Geschwindigkeiten über dem makroskopischen Teilchenindex $\bar{\alpha} = \varepsilon\alpha$ aufgetragen haben.

Nun haben wir die NEWTONschen Bewegungsgleichungen für verschiedene Teilchenzahlen N in einem gegebenen makroskopischen Zeitintervall $[0, \bar{t}_{\text{end}}]$ numerisch gelöst, wobei im konkreten Fall $\bar{t}_{\text{end}} = 0.7$ gilt. Gemäß der hyperbolischen Skalierung ergibt sich die Länge des entsprechenden mikroskopischen Zeitintervalls $[0, t_{\text{end}}]$ aus $t_{\text{end}} = N\bar{t}_{\text{end}}$.

Die numerisch berechneten atomaren Abstände und Geschwindigkeiten sind für die Teilchenzahlen $N = 100$ und $N = 16000$ in Abbildung 2.2 dargestellt. Dabei entsprechen helle bzw. dunkle Farben der kleinen bzw. der großen Teilchenzahl. In allen Plots sind die atomaren Daten für gleiche makroskopische Zeiten über dem makroskopischen Teilchenindex $\bar{\alpha}$ aufgetragen, wobei, entsprechend der hyperbolischen Skalierung, die atomaren Abstände und Geschwindigkeiten selbst nicht skaliert werden.

Die numerisch berechneten Daten können wie folgt interpretiert werden:

1. Bis zum makroskopischen Zeitpunkt $\bar{t} \approx 0.5$ konvergieren die atomaren Daten für große Teilchenzahlen gegen glatte makroskopische Funktionen, so dass wir in jedem makroskopischen Punkt $(\bar{t}, \bar{\alpha})$ genau einen Wert für den atomaren Abstand und genau einen Wert für die atomare Geschwindigkeit erhalten.
2. Zur Zeit $\bar{t} \approx 0.5$ entwickeln die makroskopischen Grenzwerte zwei Stöße, d.h. ihr Gradient bzgl. $\bar{\alpha}$ wird unendlich groß. Aus diesen Stößen entwickeln sich mikroskopische Oszillationen, so dass es aus makroskopischer Sicht unmöglich ist, den atomaren Daten weiterhin eindeutige Werte zuzuordnen.

Während für $\bar{t} \lesssim 0.5$ die atomaren Daten ausschließlich auf der makroskopischen Skala variieren, oszillieren sie hinter den Stößen auf der mikroskopischen Skala. Diese mikroskopische Oszillationen interpretieren wir als einen Ausdruck von Temperatur in der atomaren

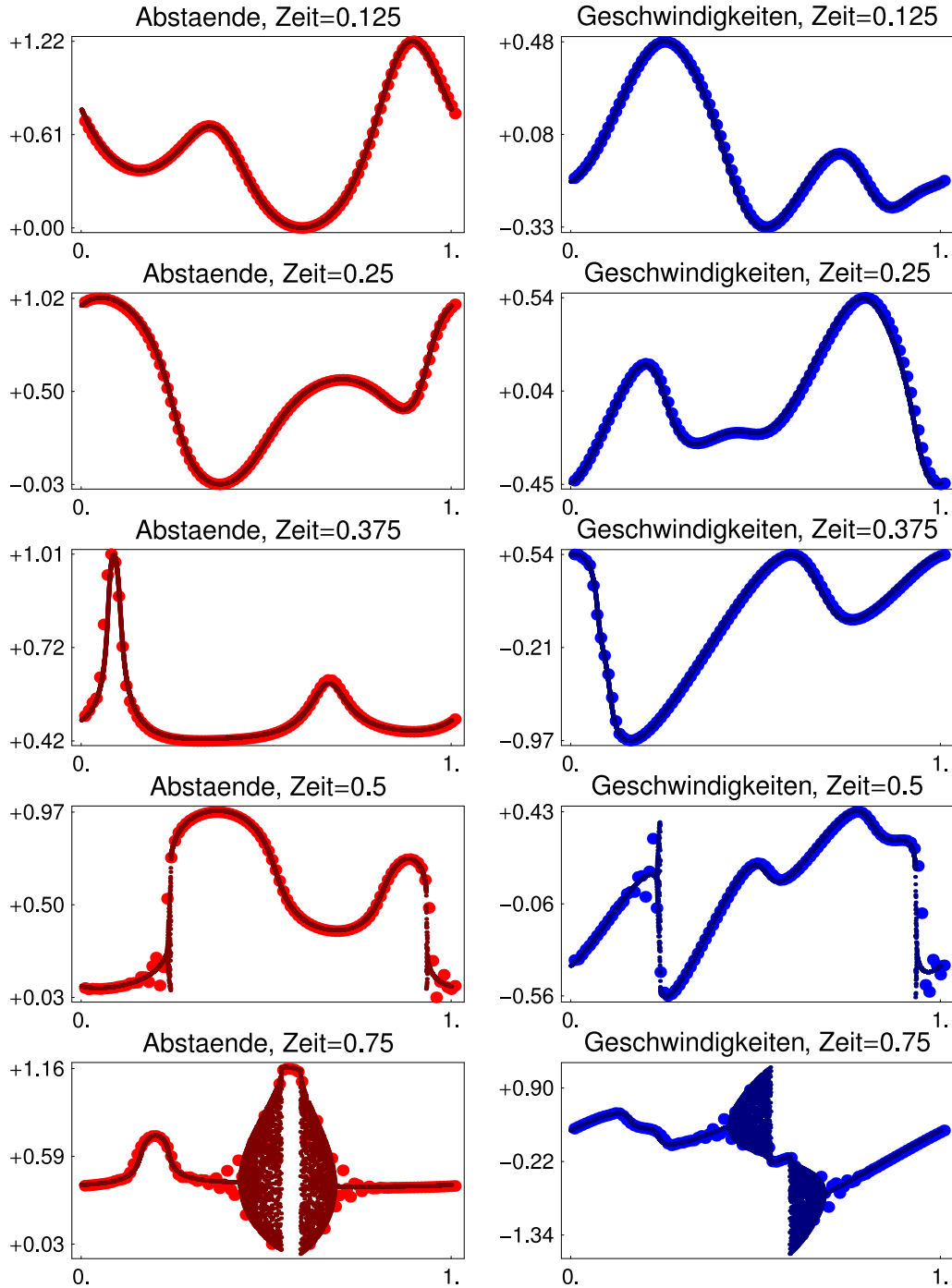


Abb. 2.2: Die atomaren Abstände und Geschwindigkeiten für Beispiel *B1* über dem makroskopischen Teilchenindex: Zu verschiedenen makroskopischen Zeiten sind die Daten für $N=100$ (hell) zusammen mit den Daten für $N=16000$ (dunkel) dargestellt. **Interpretation:** Bis zum Zeitpunkt $\bar{t} \approx 0.5$ bleiben die atomaren Daten kalt. Bei $\bar{t} \approx 0.5$ werden die makroskopischen Daten unstetig, und die atomaren Daten bilden Temperatur, d.h. sie oszillieren um makroskopische Mittelwerte. \diamond

Kette. Da für $\bar{t} \lesssim 0.5$ die Daten keine mikroskopischen Oszillationen entwickeln, sprechen wir in diesem Gebiet von kalten Daten.

Wir fassen unsere Interpretation wie folgt zusammen: Wenn wir mit kalten Anfangsdaten

wie in (2.2.11) starten, so konvergieren unter der hyperbolischen Skalierung die atomaren Daten für $N \rightarrow \infty$ und für hinreichend kleine makroskopische Zeiten \bar{t} gegen makroskopische Funktionen. Es ist jedoch möglich, dass die atomaren Daten irgendwann Temperatur entwickeln, und dann nicht mehr gegen makroskopische Funktionen konvergieren.

Es stellen sich daher folgende Probleme:

1. Wie können wir die makroskopische Evolution der Grenzwerte kalter Daten beschreiben?
2. Können wir die entstehenden mikroskopischen Oszillationen charakterisieren?

Die erste Frage werden wir in Abschnitt 2.2.6 in dem Sinne beantworten, dass wir makroskopische partielle Differentialgleichungen für die oben genannten Grenzwerte herleiten. Das zweite Problem ist wesentlich komplexer, und wird im weiteren Verlauf ausführlich untersucht werden.

2.2.2.2 Beispiel B2: Daten mit Temperatur

Im letzten Beispiel haben wir gesehen, dass die atomare Kette Temperatur, d.h. mikroskopische Oszillationen, entwickeln kann. Wir wollen nun in diesem Abschnitt solche Lösungen mit Temperatur etwas näher untersuchen, um die Struktur dieser Oszillationen zumindest qualitativ zu verstehen. Aus diesem eher didaktischen Grund werden wir hier nicht die Oszillationen aus Beispiel B1 betrachten, sondern eine zweite numerische Simulation untersuchen, bei der wir die Oszillationen bereits in den Anfangsdaten erzeugen. Wir werden aber im Kapitel 5 zu den Oszillationen aus Beispiel B1 zurückkommen.

Um Anfangsdaten mit Temperatur zu generieren, wählen wir vier makroskopische Funk-

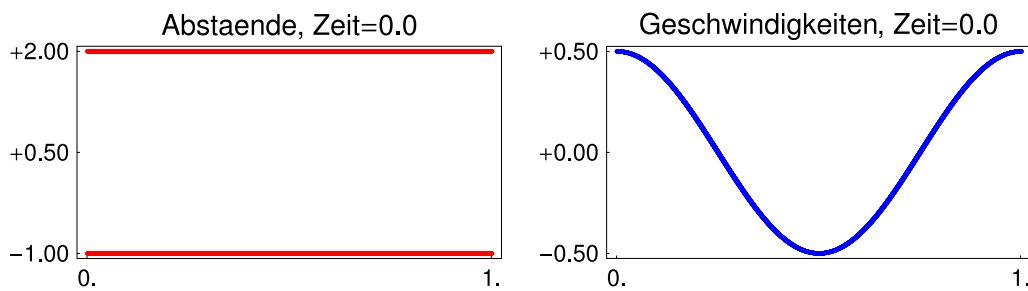


Abb. 2.3: Modulierte Anfangsdaten mit Temperatur für Beispiel B2 über dem makroskopischen Teilchenindex. \diamond

tionen $r_{\text{ini}}^{\text{ung}}$ und $r_{\text{ini}}^{\text{ger}}$ sowie $v_{\text{ini}}^{\text{ung}}$ und $v_{\text{ini}}^{\text{ger}}$, die alle vom makroskopischen Teilchenindex $\bar{\alpha}$ abhängen. Die atomaren Abstände und Geschwindigkeiten werden nun wie folgt initialisiert:

$$\begin{aligned} r_{\alpha}(0) &= \begin{cases} r_{\text{ini}}^{\text{ung}}(\varepsilon\alpha) & \text{falls } \alpha \text{ ungerade,} \\ r_{\text{ini}}^{\text{ger}}(\varepsilon\alpha) & \text{falls } \alpha \text{ gerade,} \end{cases} \\ v_{\alpha}(0) &= \begin{cases} v_{\text{ini}}^{\text{ung}}(\varepsilon\alpha) & \text{falls } \alpha \text{ ungerade,} \\ v_{\text{ini}}^{\text{ger}}(\varepsilon\alpha) & \text{falls } \alpha \text{ gerade.} \end{cases} \end{aligned} \quad (2.2.13)$$

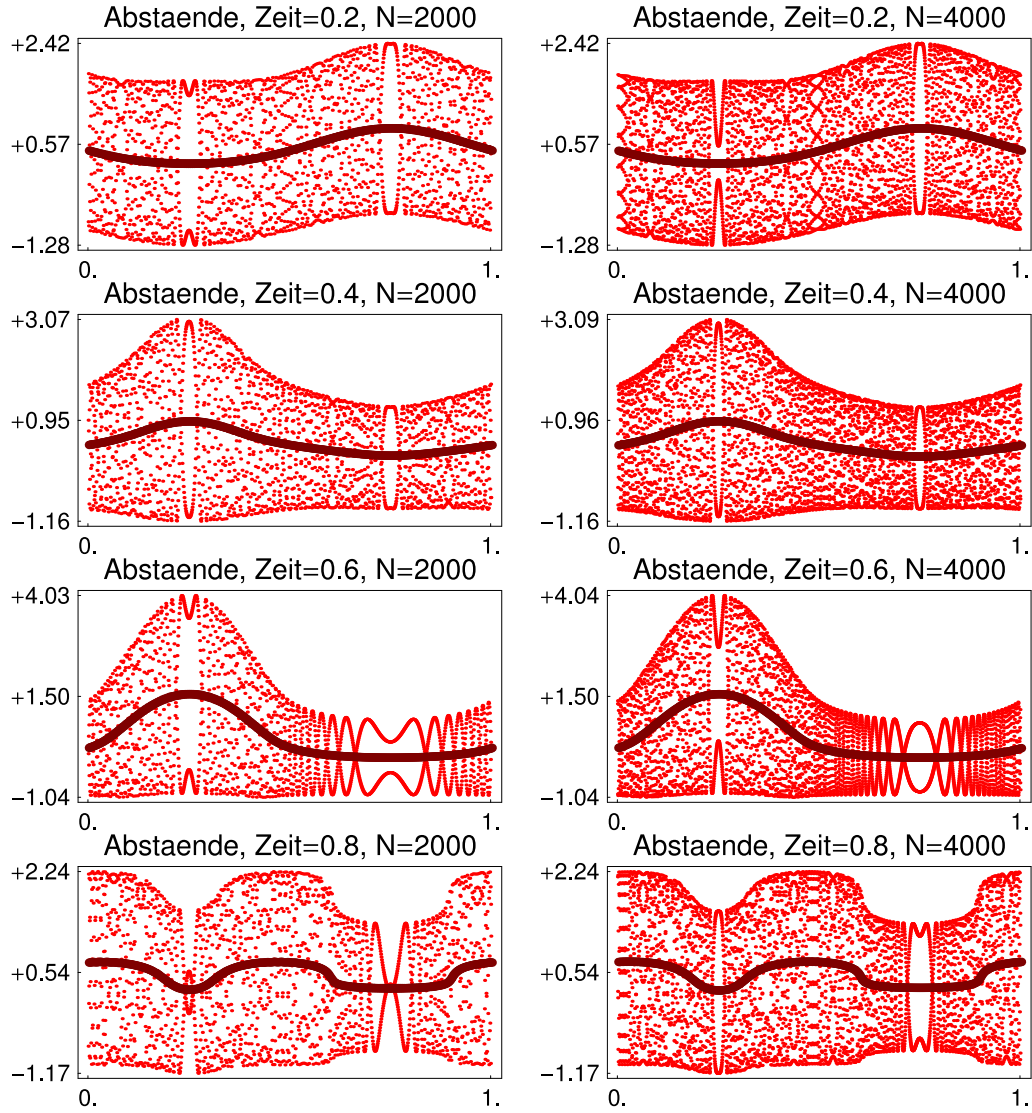


Abb. 2.4: Die atomaren Abstände für Beispiel *B2* über dem makroskopischen Teilchenindex: Zu verschiedenen makroskopischen Zeiten sind die Daten für $N=2000$ denen für $N=4000$ gegenübergestellt. Vergleiche dazu die entsprechenden atomaren Geschwindigkeiten in Abbildung 2.5. **Interpretation:** Die atomaren Daten oszillieren um makroskopische Mittelwerte. Im Limes $n \rightarrow \infty$ können wir aber Konvergenz im Sinne YOUNG'scher Maße erwarten. \diamond

Später in Kapitel 4 werden wir diese Art von Anfangsdaten als *modulierte binäre Oszillationen* identifizieren. Im konkreten Fall, vgl. Abbildung 2.3, gilt

$$r^{\text{ung}}(\bar{\alpha}) = -1, \quad r^{\text{ger}}(\bar{\alpha}) = 2 \quad (2.2.14)$$

sowie

$$v^{\text{ung}}(\bar{\alpha}) = v^{\text{ger}}(\bar{\alpha}) = \frac{1}{2} \cos(2\pi\bar{\alpha}). \quad (2.2.15)$$

Wie wir sehen, sind die Anfangsabstände nicht mehr makroskopisch, und es ist leicht einzusehen, dass auch die atomaren Geschwindigkeiten sofort mikroskopische Oszillationen entwickeln.

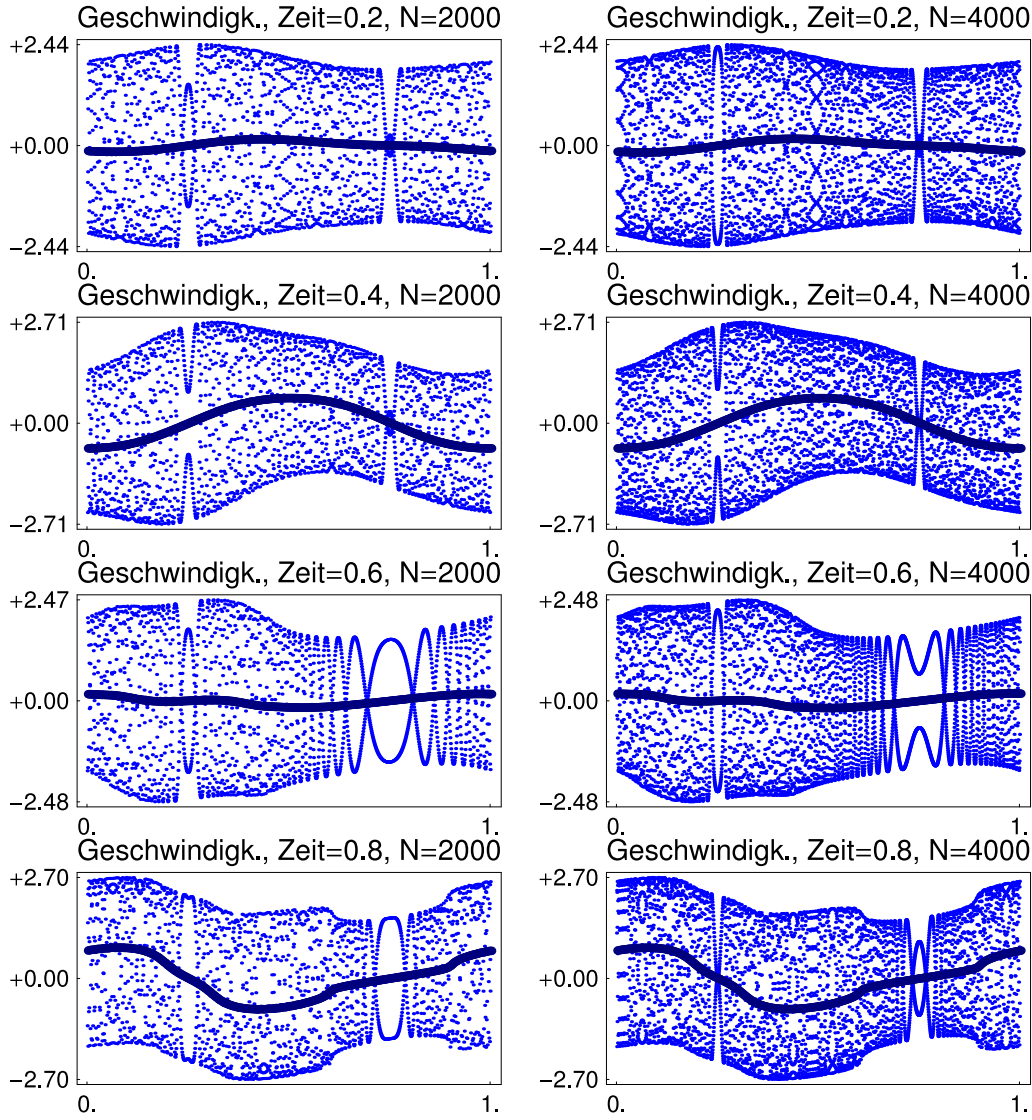


Abb. 2.5: Die atomaren Geschwindigkeiten zu den atomaren Abständen aus Abbildung 2.4. \diamond

Analog zu Beispiel *B1* haben wir die NEWTONschen Gleichungen für verschiedene Teilchenzahlen in einem festen makroskopischen Zeitintervall $[0, \bar{t}_{\text{end}}]$ numerisch gelöst. Die berechneten atomaren Abstände und Geschwindigkeiten sind in den Abbildungen 2.4 bzw. 2.5 dargestellt, wobei wieder alle Daten über dem makroskopischen Teilchenindex aufgetragen sind. Zu jeweils gleichen makroskopischen Zeitpunkten haben wir in der linken Spalte die Daten für $N = 2000$ den Daten für $N = 4000$ aus der rechten Spalte gegenübergestellt. Die Bedeutung der dunkler gefärbten makroskopischen Funktionen wird gleich erklärt.

Die numerischen Ergebnisse illustrieren die folgenden Hypothesen:

1. Die atomaren Daten produzieren mikroskopische Oszillationen, die auf der makroskopischen Skala nicht mehr durch Funktionen, sondern nur noch durch YOUNG-Maße beschrieben werden können.

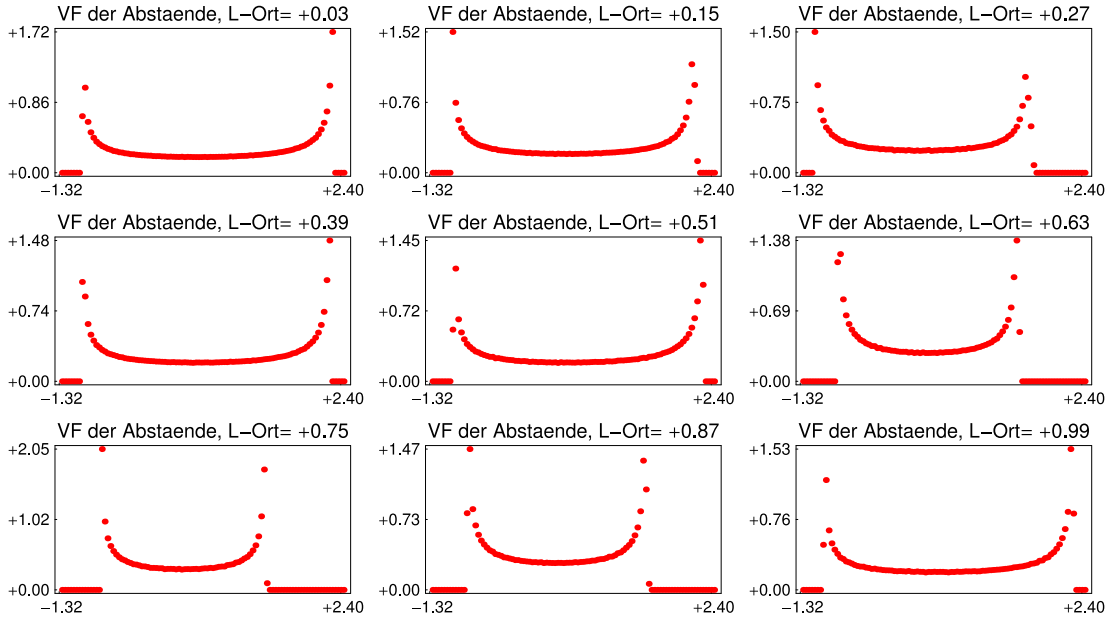


Abb. 2.6: Die lokalen Verteilungsfunktionen der atomaren Abstände aus Beispiel *B2* an ausgewählten makroskopischen Punkten. Es gilt $N = 4000$, $\bar{t} = 0.8$ und $\bar{\alpha}$ wie angegeben (“L-Ort,,). \diamond

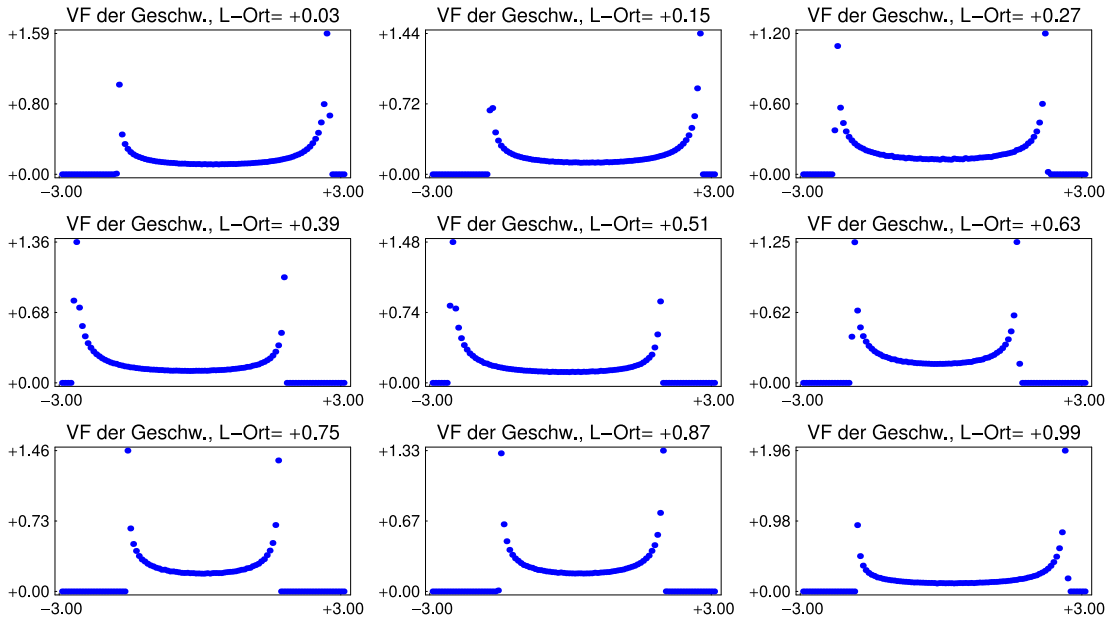


Abb. 2.7: Die lokalen Verteilungsfunktionen der Geschwindigkeiten zu den Verteilungsfunktionen der Abstände aus Abbildung 2.6. \diamond

2. Für $N \rightarrow \infty$ können wir Konvergenz der YOUNG-Maße erwarten. Das liegt natürlich daran, dass die Anfangsdaten im Sinne YOUNGScher Maße konvergieren.
3. Die YOUNG-Maße erzeugen makroskopische Funktionen, die die lokalen Mittelwerte von atomaren Größen beschreiben. Die lokalen Mittelwerte der Abstände und Geschwindigkeiten sind mit dunkleren Farben in den Abbildungen 2.4 bzw. 2.5 gezeichnet. Für $N \rightarrow \infty$ können wir makroskopische Konvergenz der lokalen Mittel-

werte erwarten.

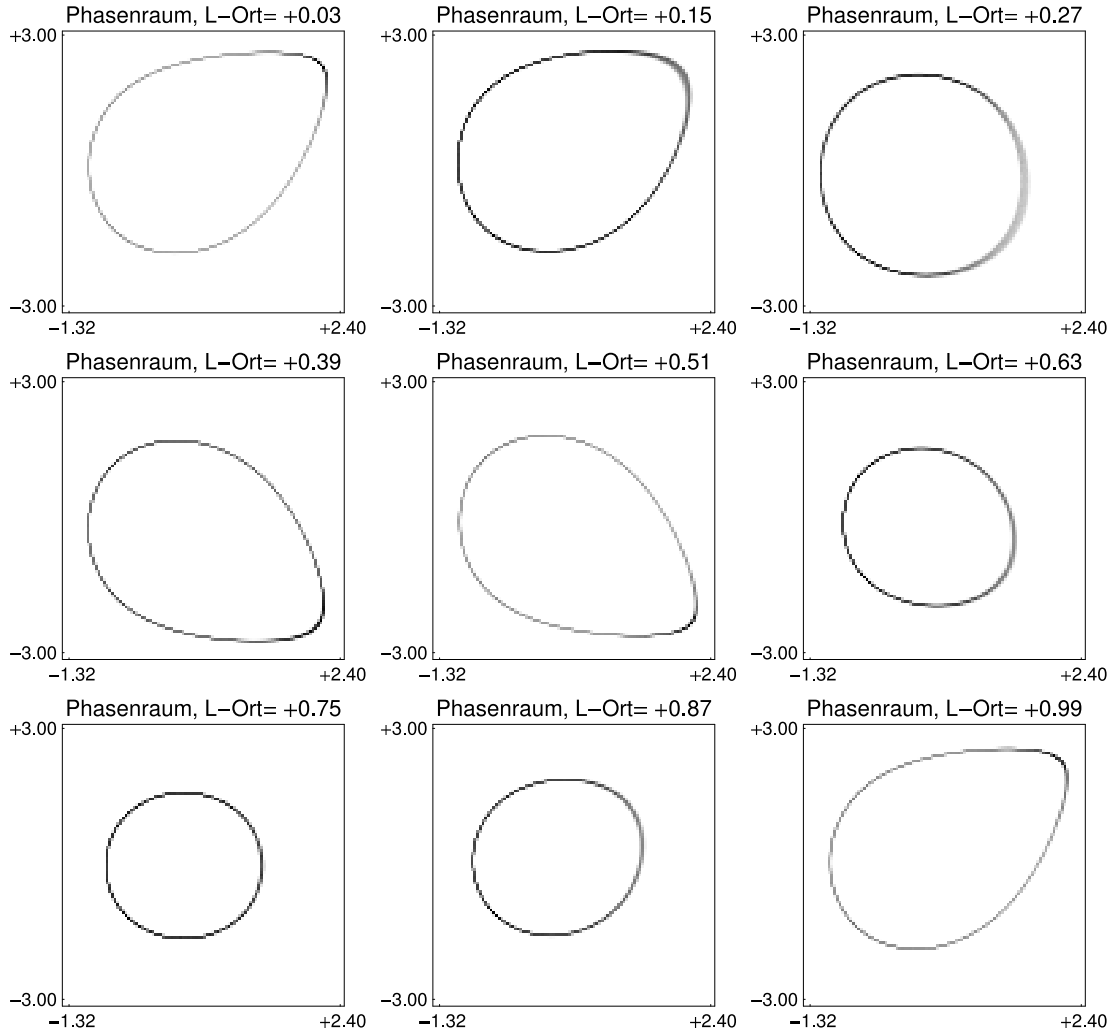


Abb. 2.8: Die lokalen Verteilungsfunktionen im mikroskopischen Phasenraum, die zu den Verteilungsfunktionen aus den Abbildungen 2.6 und 2.7 gehören. **Interpretation:** Die Träger der Verteilungsfunktionen sind geschlossene Kurven im mikroskopischen Phasenraum. \diamond

Im Folgenden wollen wir Struktur der mikroskopischen Oszillationen genauer untersuchen. Dazu betrachten wir *Fenster* in der LAGRANGE-Raum-Zeit, die mikroskopisch sehr groß und makroskopisch sehr klein sind. Insbesondere entspricht jedem Fenster genau ein makroskopischer Punkt.

Nun können wir innerhalb dieser Fenster die statistischen Verteilungen der atomaren Daten betrachten. Wir werden später in Abschnitt 5.2.3 detailliert beschreiben, wie wir diese Verteilungen aus den numerisch berechneten Daten gewinnen können. Im Moment wollen wir diese Details aber außer Acht lassen und uns gleich den Ergebnissen zuwenden.

Für neun verschiedene Fenster haben wir die resultierenden Verteilungsfunktionen der Abstände und Geschwindigkeiten mit $N = 4000$ numerisch berechnet, siehe Abbildungen 2.6 und 2.7. Für jedes Fenster ist $\bar{t} = 0.8$; der jeweilige makroskopische Teilchenindex $\bar{\alpha}$

(„L-Ort“) kann den Abbildungen entnommen werden. Wir erwähnen, dass die Verteilungsfunktionen für große N nicht mehr von N abhängen.

Eine sehr wichtige Strukturinformation über die mikroskopischen Oszillationen erhalten wir, wenn wir die Verteilungsfunktionen im *mikroskopischen Phasenraum* untersuchen. Dabei meint der Begriff „mikroskopischer Phasenraum“ den zweidimensionalen Raum, der von Abstand und Geschwindigkeit aufgespannt wird. In Abbildung 2.7 haben wir für $N = 4000$ in den oben beschriebenen Fenstern die resultierenden Verteilungen im Phasenraum als Dichtegrafik dargestellt, wobei dunkel bzw. hell eine hohe bzw. geringe Wahrscheinlichkeit bedeuten.

Wir sehen, dass den mikroskopischen Oszillationen in jedem Fenster stark lokalisierte Verteilungen entsprechen, deren Träger auf geschlossenen Kurven liegen. Daher gibt es eine starke Korrelation zwischen den Oszillationen der atomaren Abstände und denen der atomaren Geschwindigkeiten. Die stark lokalisierten Verteilungen beobachten wir nur, wenn die Fenster makroskopisch sehr klein, aber mikroskopisch sehr groß sind. Mit anderen Worten: Für jeden makroskopischen Punkt in der Raum-Zeit erhalten wir eine andere Verteilungsfunktion im mikroskopischen Phasenraum, welche die lokale Statistik der mikroskopischen Oszillationen beschreibt.

Ein wesentliches Ziel dieser Arbeit besteht darin, (i) die Struktur der Verteilungsfunktionen zu erklären, und (ii) ihre makroskopische Dynamik abzuleiten. Dazu werden wir in den Kapiteln 3 und 4 schrittweise die Theorie der modulierten Traveling-Waves entwickeln, um schließlich in Kapitel 5 zu den numerisch berechneten Verteilungsfunktionen zurückzukehren.

2.2.3 Die hyperbolische Skalierung

Wie bereits in 2.2.1 beschrieben, entsteht die hyperbolische Skalierung wenn wir die mikroskopische Zeit t , den mikroskopischen Teilchenindex α und den physikalischen Ort x gleich skalieren, d.h.

$$\bar{t} = \varepsilon t, \quad \bar{x} = \varepsilon x, \quad \bar{\alpha} = \varepsilon \alpha. \quad (2.2.16)$$

Gemäß 2.2.1 nennen wir \bar{t} , $\bar{\alpha}$ bzw. \bar{x} die makroskopische Zeit, den makroskopischen Teilchen-

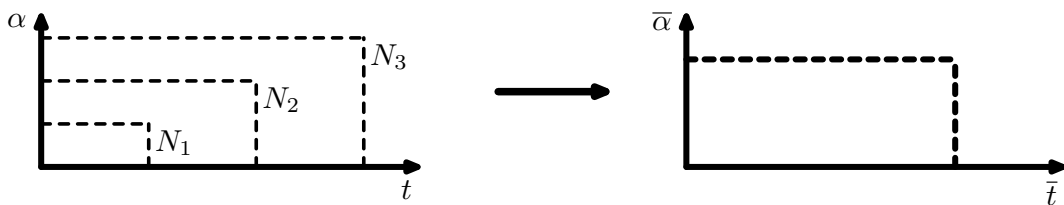


Abb. 2.9: Schematische Darstellung der hyperbolischen Skalierung. \diamond

index bzw. die makroskopischen Position. Mit Ausnahme von t , x und α werden alle anderen

Größen, also insbesondere die atomaren Abstände, Geschwindigkeiten und Energien, nicht skaliert. Abschließend werden wir die hyperbolische Skalierung in Form eines Einbettungsoperators I_N mathematisch präzise beschreiben.

Definition 2.2.1 *Sei N eine gegebene Teilchenzahl und sei $\varepsilon = 1/N$ der entsprechende Skalierungsparameter. Dann definieren wir einen abstrakten Einbettungsoperator I_N in den Raum der Funktionen wie folgt: Sei ψ irgendeine atomare Größe, d.h. ein zeitabhängiger, N -dimensionaler Vektor, wobei $\psi_\alpha(t)$ den Wert von ψ im Teilchen α zur Zeit t angibt. Dann ist $I_N\psi$ eine Funktion, die von der makroskopischen Zeit \bar{t} und dem makroskopischen Teilchenindex $\bar{\alpha}$ abhängt und folgende Eigenschaften besitzt:*

1. Für alle t und alle $\alpha = 1 \dots N$ gilt

$$I_N\psi(\varepsilon t, \varepsilon\alpha) = \psi_\alpha(t). \quad (2.2.17)$$

2. Für festes \bar{t} ist die Funktion

$$\bar{\alpha} \mapsto I_N\psi(\bar{t}, \bar{\alpha}), \quad \bar{\alpha} \in [0, 1], \quad (2.2.18)$$

stückweise konstant und rechtsseitig stetig, d.h.

$$(I_N\psi)(\bar{t}, \bar{\alpha} + \delta) = \psi(\bar{t}, \bar{\alpha}) \quad \forall 0 \leq \delta < \varepsilon. \quad (2.2.19)$$

3. Durch die Periodizitätsbedingung

$$(I_N\psi)(\bar{t}, \bar{\alpha} \pm 1) = (I_N\psi)(\bar{t}, \bar{\alpha}) \quad (2.2.20)$$

wollen wir $I_N\psi$ für alle reellen $\bar{\alpha}$ definieren.

Der formale Operator I_N bildet atomare Größen auf Funktionen ab, die von den makroskopischen Variablen \bar{t} und $\bar{\alpha}$ abhängen, und erlaubt daher einen Vergleich von atomaren Ketten mit verschiedenen Teilchenzahlen. Im Falle kalter Daten bzw. für Daten mit Temperatur erwarten wir das folgende Verhalten von $I_N\psi$, vgl. dazu Abschnitt 2.2.2:

1. Die Sprünge von $I_N\psi$ sind von Ordnung $\mathcal{O}(\varepsilon)$ bzw. $\mathcal{O}(1)$.

2. Die Ableitung $\frac{\partial (I_N\psi)}{\partial \bar{t}}$ ist von Ordnung $\mathcal{O}(1)$ bzw. $\mathcal{O}(\frac{1}{\varepsilon})$.

Bei späteren Anwendungen des Operators I_N werden wir häufig von den folgenden elementaren Formeln Gebrauch machen:

$$\begin{aligned} (I_N\dot{\psi})(\bar{t}, \bar{\alpha}) &= \varepsilon \frac{\partial I_N\psi}{\partial \bar{t}}(\bar{t}, \bar{\alpha}), \\ (I_N\nabla_+\psi)(\bar{t}, \bar{\alpha}) &= (I_N\psi)(\bar{t}, \bar{\alpha} + \varepsilon) - (I_N\psi)(\bar{t}, \bar{\alpha}), \\ (I_N\nabla_-\psi)(\bar{t}, \bar{\alpha}) &= (I_N\psi)(\bar{t}, \bar{\alpha}) - (I_N\psi)(\bar{t}, \bar{\alpha} - \varepsilon). \end{aligned} \quad (2.2.21)$$

2.2.4 Allgemeine Strategie für den Mikro-Makro-Übergang

In diesem Abschnitt beschreiben wir die allgemeine Strategie, mit der wir Mikro-Makro-Übergänge etablieren werden. Dazu betrachten wir eine Folge von atomaren Ketten mit Teilchenzahlen $j \mapsto N_j$ und Skalierungsparametern $j \mapsto \varepsilon_j = 1/N_j$. Dabei ist eine atomare Kette mit Teilchenzahl N_j nichts anderes als eine Lösung der NEWTONschen Bewegungsgleichungen (2.1.3), die für hinreichend große mikroskopische Zeitintervalle $t \in [0, t_j]$ definiert ist. Entsprechend unserer Skalierung sollte t_j proportional zu N_j sein. In diesem Abschnitt wollen wir immer von periodischen Randbedingungen ausgehen. Weiterhin wollen wir annehmen, dass die Teilchenzahl N_j mit wachsendem j immer größer wird, d.h. $\varepsilon_j \searrow 0$ für $j \rightarrow \infty$.

Sei nun ψ eine atomare Größe wie Abstand, Geschwindigkeit oder Energie. Jede Kette j mit Teilchenzahl N_j liefert nun N_j zeitabhängige Funktionen $\psi_\alpha^{(j)}$, wobei α die ganzzahligen Werte von $1 \dots N_j$ durchläuft. Der Wert $\psi_\alpha^{(j)}(t)$ gibt dabei an, welchen Wert die atomare Größe ψ im Teilchen α der j -ten Kette zur mikroskopischen Zeit t annimmt.

Mit Hilfe der Operatoren I_{N_j} aus Definition 2.2.1 können wir jetzt alle atomaren Größen auf die makroskopische LAGRANGE-Raum-Zeit abbilden. Für jede atomare Größe ψ erhalten wir so eine Folge von Funktionen

$$j \mapsto \psi^{(j)} = I_{N_j} \psi, \quad (2.2.22)$$

die von der makroskopischen Zeit \bar{t} und dem makroskopischen Teilchenindex $\bar{\alpha} \in [0, 1]$ abhängen. Gemäß Definition 2.2.1 gilt

$$\psi_\alpha^{(j)}(t) = (I_{N_j} \psi)(\varepsilon_j t, \varepsilon_j \alpha) = \psi^{(j)}(\varepsilon_j t, \varepsilon_j \alpha) \quad (2.2.23)$$

für alle j , alle $t \geq 0$ und beliebige $\alpha \in \{1, \dots, N_j\}$. Die wichtigsten atomaren Größen sind natürlich die atomaren Abstände und Geschwindigkeiten:

$$r^{(j)}(\varepsilon_j t, \varepsilon_j \alpha) = r_\alpha^{(j)}(t), \quad (2.2.24)$$

$$v^{(j)}(\varepsilon_j t, \varepsilon_j \alpha) = v_\alpha^{(j)}(t). \quad (2.2.25)$$

Ein *Mikro-Makro-Übergang* umfasst folgende Teilprobleme:

- A. Charakterisierung der Konvergenz der Funktionen $\psi^{(j)}$,
- B. Makroskopische Evolutionsgleichungen für die Grenzwerte.

Wir werden nun auf beide Teilprobleme näher eingehen.

Teilproblem A

Wir haben in den Abschnitten 2.2.2 und 2.2.3 gesehen, dass wir nur im Falle kalter Daten erwarten können, dass die Funktionen $\psi^{(j)}$ gegen makroskopische Funktionen konvergieren, wobei zunächst offen bleibt, in welcher Topologie die Konvergenz bewiesen werden kann. Im Falle von Daten mit Temperatur verhindern die mikroskopischen Oszillationen, dass der

Grenzwert der Funktionen $\psi^{(j)}$ vollständig durch Funktionen beschrieben werden kann. Wir hatten bereits erwähnt, dass in diesem Fall die Grenzwerte nur im Rahmen der Theorie der YOUNG-Maße charakterisiert werden können. Wir werden das in Abschnitt 2.2.7 ausführlicher diskutieren.

Teilproblem B

Das zweite Problem werden wir in Abschnitt 2.2.6 für den Fall kalter Daten lösen können. Für Daten mit Temperatur ist dieses Problem schwieriger und zerfällt wiederum in verschiedene Unterprobleme. Zunächst einmal muss geklärt werden, wie man die mikroskopischen Oszillationen auf der makroskopischen Skala beschreibt. Wir werden im weiteren Verlauf sehen, dass die mikroskopischen Oszillationen, zumindest in vielen Fällen, vollständig durch einige wenige makroskopische Parameter beschrieben werden können. Diese makroskopischen Parameter sind zum einen die lokalen Mittelwerte atomarer Größen wie Abstand, Geschwindigkeit und Energie. Zum anderen werden wir makroskopische Parameter einführen, die auf der mikroskopischen Skala keine unmittelbare Interpretation besitzen. Schließlich werden wir in Kapitel 4 makroskopische Evolutionsgleichungen mit Temperatur ableiten.

Allerdings sind wir noch weit davon entfernt, alle bei einem Mikro-Makro-Übergang mit Temperatur auftretenden Fragen und Probleme vollständig beantworten zu können, und so wird im Folgenden vieles offen bleiben. Es gibt allerdings eine Eigenschaft des resultierenden thermodynamischen Limes, über deren Gültigkeit kein Zweifel bestehen kann:

Im thermodynamischen Limes müssen die makroskopischen Erhaltungssätze für Masse, Impuls und Energie gelten.

Im folgenden Abschnitt werden wir daher zeigen, wie unter der hyperbolischen Skalierung alle drei Erhaltungssätze in lokaler Form abgeleitet werden können.

2.2.5 Makroskopische Erhaltungsgleichungen

Im weiteren Verlauf dieses Unterkapitels betrachten wir stets ein festes makroskopisches Zeitintervall $[0, \bar{t}_{\text{end}}]$ und setzen $G = [0, \bar{t}_{\text{end}}] \times [0, 1]$.

Um die makroskopischen Erhaltungsgleichungen zu etablieren, betrachten wir den thermodynamischen Limes der Dichten und Flüsse aus den diskreten Erhaltungsgleichungen (2.1.30)–(2.1.33). Die mikroskopischen Größen sind im Einzelnen:

Abstand	$r_\alpha^{(j)}(t),$	
Geschwindigkeit	$v_\alpha^{(j)}(t),$	
Kraft	$p_\alpha^{(j)}(t)$	$= -\Phi'(r_\alpha^{(j)}(t)),$
Energiedichte	$e_\alpha^{(j)}(t)$	$= \frac{1}{2}(v_{\alpha+1}^{(j)}(t))^2 + \Phi(r_\alpha^{(j)}(t)),$
Energiefluss	$f_\alpha^{(j)}(t)$	$= -v_\alpha^{(j)}(t) \Phi'(r_\alpha^{(j)}(t)),$

(2.2.26)

wobei der Index (j) wieder die j -te atomare Kette bezeichnet. Wie in 2.2.4 beschrieben, betrachten wir die resultierenden Folgen makroskopischer Funktionen. Das sind

$$j \mapsto r^{(j)}, \quad j \mapsto v^{(j)}, \quad j \mapsto p^{(j)}, \quad j \mapsto e^{(j)}, \quad j \mapsto f^{(j)}. \quad (2.2.27)$$

Wir erinnern daran, das gemäß (2.2.24) gilt:

$$r^{(j)}(\varepsilon_j t, \varepsilon_j \alpha) = r_\alpha^{(j)}(t), \quad v^{(j)}(\varepsilon_j t, \varepsilon_j \alpha) = v_\alpha^{(j)}(t), \quad \dots \quad (2.2.28)$$

Theorem 2.2.2 *Sei $j \mapsto N_j$ eine Folge von atomaren Ketten, so dass die in (2.2.27) aufgeführten Funktionenfolgen schwach* in $L^s(G)$, $1 < s \leq \infty$, konvergieren, d.h.*

$$r^{(j)} \rightharpoonup r^{(\infty)}, \quad v^{(j)} \rightharpoonup v^{(\infty)}, \quad p^{(j)} \rightharpoonup p^{(\infty)}, \quad e^{(j)} \rightharpoonup e^{(\infty)}, \quad f^{(j)} \rightharpoonup f^{(\infty)}.$$

Dann gelten die folgenden Erhaltungsgleichungen

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} \begin{pmatrix} r^{(\infty)} \\ v^{(\infty)} \\ e^{(\infty)} \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} \begin{pmatrix} -v^{(\infty)} \\ +p^{(\infty)} \\ +f^{(\infty)} \end{pmatrix} = 0 \quad (2.2.29)$$

im Sinne der Distributionen.

Beweis: Wir beginnen mit dem Erhaltungssatz der Masse. Sei j fixiert. Mit (2.2.21) liefert die diskrete Massebilanz (2.1.30) die Gleichung

$$\frac{\partial r^{(j)}}{\partial \bar{t}}(\bar{t}, \bar{\alpha}) = \frac{v^{(j)}(\bar{t}, \bar{\alpha} + \varepsilon_j) - v^{(j)}(\bar{t}, \bar{\alpha})}{\varepsilon_j}, \quad (2.2.30)$$

wobei $\bar{\alpha}$ beliebig ist. Sei $\varphi \in \mathcal{C}_0^\infty(G)$ eine glatte Testfunktion mit kompaktem Träger in G . Dann gilt

$$\begin{aligned} \int_G r^{(j)}(\bar{t}, \bar{\alpha}) \frac{\partial \varphi}{\partial \bar{t}}(\bar{t}, \bar{\alpha}) \, d\bar{t} d\bar{\alpha} &= - \int_G \varphi(\bar{t}, \bar{\alpha}) \frac{\partial r^{(j)}}{\partial \bar{t}}(\bar{t}, \bar{\alpha}) \, d\bar{t} d\bar{\alpha} \\ &= - \int_G \varphi(\bar{t}, \bar{\alpha}) \frac{v^{(j)}(\bar{t}, \bar{\alpha} + \varepsilon_j) - v^{(j)}(\bar{t}, \bar{\alpha})}{\varepsilon_j} \, d\bar{t} d\bar{\alpha} \\ &= \int_G v^{(j)}(\bar{t}, \bar{\alpha}) \frac{\varphi(\bar{t}, \bar{\alpha}) - \varphi(\bar{t}, \bar{\alpha} - \varepsilon_j)}{\varepsilon_j} \, d\bar{t} d\bar{\alpha}. \end{aligned} \quad (2.2.31)$$

Hierbei haben wir benutzt, dass die Funktionen $r^{(j)}$ differenzierbar in der Zeit sind. Der Limes $j \rightarrow \infty$ liefert

$$\int_G r^{(\infty)}(\bar{t}, \bar{\alpha}) \frac{\partial \varphi}{\partial \bar{t}}(\bar{t}, \bar{\alpha}) \, d\bar{t} d\bar{\alpha} = \int_G v^{(\infty)}(\bar{t}, \bar{\alpha}) \frac{\partial \varphi}{\partial \bar{\alpha}}(\bar{t}, \bar{\alpha}) \, d\bar{t} d\bar{\alpha} \quad (2.2.32)$$

und damit

$$\frac{\partial r^{(\infty)}}{\partial \bar{t}}(\bar{t}, \bar{\alpha}) - \frac{\partial v^{(\infty)}}{\partial \bar{\alpha}}(\bar{t}, \bar{\alpha}) = 0 \quad (2.2.33)$$

im Sinne der Distributionen. Die anderen beiden Erhaltungssätze können vollkommen analog bewiesen werden. \square

Abschließend bemerken wir:

1. In den Voraussetzungen von Theorem 2.2.2 kann schwach*-Konvergenz in $L^s(G)$ durch schwache Konvergenz in $L^s(G)$, $1 \leq s < \infty$, oder auch durch Konvergenz im Sinne der Distributionen ersetzt werden.
2. Sind die Folgen aus (2.2.27) nur beschränkt in $L^s(G)$, $1 < s \leq \infty$, so kann stets eine Teilfolge $i \mapsto j_i$ gewählt werden, so dass die Voraussetzung von Theorem 2.2.2 für die Ketten $i \mapsto N_{j_i}$ erfüllt ist.

Das Theorem 2.2.2 kann wie folgt interpretiert werden: In jedem sinnvollen thermodynamischen Limes atomarer Ketten müssen die Erhaltungssätze für Masse, Impuls und Energie gelten. Darüber hinaus verfügen wir über mikroskopische Darstellungen aller makroskopischen Dichten und Flüsse. So ergibt sich zum Beispiel der makroskopische Druck immer als schwach*-Limes der Kräfte.

Die Aussage von Theorem 2.2.2 ist jedoch sehr schwach und erlaubt im Allgemeinen keine vollständige makroskopische Beschreibung der atomaren Kette, da das System (2.2.29) nicht abgeschlossen ist, d.h. die Flüsse $p^{(\infty)}$ und $f^{(\infty)}$ sind im Allgemeinen keine Funktionen der Dichten $r^{(\infty)}$, $v^{(\infty)}$ und $e^{(\infty)}$.

2.2.6 Mikro-Makro-Übergang für kalte Daten

In diesem Abschnitt etablieren wir den thermodynamischen Limes für kalte Daten, d.h. wir nehmen im Folgenden an, dass sowohl die atomaren Abstände als auch die atomaren Geschwindigkeiten gegen makroskopische Funktionen konvergieren.

Theorem 2.2.3 *Sei $j \mapsto N^{(j)}$ eine Folge von atomaren Ketten, so dass die Folgen $j \mapsto r^{(j)}$ und $v \mapsto N^{(j)}$ stark in $L^s(G)$, $1 \leq s \leq \infty$, konvergieren, d.h.*

$$r^{(j)} \rightarrow r^{(\infty)}, \quad v^{(j)} \rightarrow v^{(\infty)}. \quad (2.2.34)$$

Dann gelten die folgenden Aussagen:

1. Die Folgen $j \mapsto p^{(j)}$, $j \mapsto e^{(j)}$ und $j \mapsto f^{(j)}$ konvergieren stark in $L^s(G)$ mit

$$\begin{aligned} p^{(j)} &\rightarrow -\Phi'(r^{(\infty)}), \\ e^{(j)} &\rightarrow \frac{1}{2}(v^{(\infty)})^2 + \Phi(r^{(\infty)}), \\ f^{(j)} &\rightarrow -v^{(\infty)}\Phi'(r^{(\infty)}), \end{aligned} \quad (2.2.35)$$

sofern die Funktionen $\Phi(r^{(\infty)})$, $\Phi'(r^{(\infty)})$, $(v^{(\infty)})^2$ und $v^{(\infty)}\Phi'(r^{(\infty)})$ in $L^s(G)$ liegen.

2. Der thermodynamische Limes wird vollständig durch das folgende nichtlineare 2×2 -System beschrieben:

$$\frac{\partial r^{(\infty)}}{\partial \bar{t}} - \frac{\partial v^{(\infty)}}{\partial \bar{\alpha}} = 0, \quad \frac{\partial v^{(\infty)}}{\partial \bar{t}} - \frac{\partial \Phi'(r^{(\infty)})}{\partial \bar{\alpha}} = 0. \quad (2.2.36)$$

Beweis: Alle Behauptungen folgen unmittelbar aus den Voraussetzungen und Theorem 2.2.2. \square

Lemma 2.2.4 *Falls das atomare Wechselwirkungspotential (strikt) konvex ist, so ist das System (2.2.36) (strikt) hyperbolisch mit den charakteristischen Geschwindigkeiten $\pm \sqrt{\Phi''(r^{(\infty)})}$. Außerdem ist die Energiebilanz*

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} \left(\frac{1}{2} (v^{(\infty)})^2 + \Phi(r^{(\infty)}) \right) - \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} (v^{(\infty)} \Phi'(r^{(\infty)})) = 0 \quad (2.2.37)$$

eine konvexe Erweiterung von (2.2.36).

Beweis: Alle Behauptungen sind direkte Konsequenzen aus Theorem 2.2.3 und elementaren Rechnungen. \square

Für konvexes Φ ist das dann hyperbolische System (2.2.36) unter dem Namen p -System bekannt, wobei $p = -\Phi'$ der Druck ist.

Theorem 2.2.3 etabliert den Mikro-Makro-Übergang für kalte Daten unter der Voraussetzung, dass die Folgen $j \mapsto r^{(j)}$ und $j \mapsto v^{(j)}$ stark gegen Funktionen konvergieren. Wir haben aber keine Aussage darüber getroffen, wann diese Konvergenz zu erwarten ist. Numerische Simulationen, wie das Beispiel B1 aus Abschnitt 2.2.2, legen die Vermutung nahe, dass die Konvergenz für glatte Anfangsdaten zu erwarten ist, zumindest im Falle konvexer Wechselwirkungspotentiale Φ , und für makroskopische Zeiten, die so klein sind, dass die Lösung des Systems (2.2.36) glatt bleibt.

2.2.7 Mikroskopische Oszillationen und YOUNG-Maße

Sei $j \mapsto N_j$ wieder ein Folge atomarer Ketten wie in Abschnitt 2.2.1. Im Falle von Daten mit Temperatur können wir nicht erwarten, dass die mittels der Operatoren I_{N_j} definierten Funktionenfolgen $j \mapsto \psi^{(j)} = I_{N_j} \psi$ gegen makroskopische Funktionen konvergieren. Deshalb beschreiben wir in diesem Abschnitt, wie wir im Rahmen der Theorie YOUNG'scher Maße trotzdem von Konvergenz atomarer Ketten reden können. Dabei werden wir auf die in Anhang B bereitgestellten Resultate zurückgreifen.

Um die Darstellung zu vereinfachen fordern wir, dass das atomare Wechselwirkungspotential Φ den Annahmen 2.1.1 und 2.1.2 genügt. Außerdem fassen wir den atomaren Abstand r und die atomare Geschwindigkeit v zu einem Vektor $Q = (r, v)$ zusammen. Nun können wir

die Skalierungsprozedur aus Abschnitt 2.2.3 auch auf die Größe Q anwenden. Wir erhalten dadurch eine Folge von vektorwertigen Funktionen $j \mapsto Q^{(j)}$ mit

$$Q^{(j)}(\varepsilon_j t, \varepsilon_j \alpha) = (r_\alpha^{(j)}(t), v_\alpha^{(j)}(t)). \quad (2.2.38)$$

Lemma 2.2.5 *Mit 2.1.1 und 2.1.2 gilt: Die Folge $j \mapsto Q^{(j)}$ ist genau dann in $L^2(G; \mathbb{R}^2)$ beschränkt, wenn die Folge der Anfangsdaten $j \mapsto Q^{(j)}(0, \cdot)$ in $L^2([0, 1]; \mathbb{R}^2)$ beschränkt ist.*

Beweis: Unter der Annahme 2.1.2 gilt für alle Werte r die Abschätzung

$$\frac{m}{2}r^2 + c_1 r + c_0 \leq \Phi(r) \leq \frac{M}{2}r^2 + C_1 r + C_0, \quad (2.2.39)$$

wobei c_0, c_1 sowie C_0, C_1 Konstanten sind, die unabhängig von N_j gewählt werden können. Mit

$$\mathcal{W}^{(j)}(t) := \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^{N_j} \Phi(r_\alpha^{(j)}(t)) \quad \text{und} \quad \mathcal{N}^{(j)}(t) := \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^{N_j} (r_\alpha^{(j)}(t))^2$$

kann nun leicht gezeigt werden, dass die Folge $j \mapsto \mathcal{N}^{(j)}(t)$ genau dann beschränkt ist, wenn $j \mapsto \mathcal{W}^{(j)}(t)$ beschränkt ist. Daraus schließen wir sofort, dass für jedes \bar{t} die Folge $j \mapsto Q^{(j)}(\bar{t}, \cdot)$ genau dann in $L^2([0, 1])$ beschränkt ist, wenn die Folge $j \mapsto \mathcal{E}^{(j)}(\bar{t})$ beschränkt bleibt, wobei $\mathcal{E}^{(j)}(\bar{t})$ gerade die gemittelte Gesamtenergie ist, d.h.

$$\mathcal{E}^{(j)}(\bar{t}) = \mathcal{W}^{(j)}(\bar{t}) + \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^{N_j} (v_\alpha^{(j)}(t))^2. \quad (2.2.40)$$

Zusammen mit dem Erhalt der Gesamtenergie (es gelten periodische Randbedingungen !) folgt die Behauptung. \square

Sofern wir mit beschränkten Anfangsdaten starten, können wir zumindest eine Teilfolge $i \mapsto j_i$ auswählen (vgl. Anhang B), so dass die Folge $i \mapsto Q^{(j_i)}$ gegen ein YOUNGSches Maß $\mu = \mu(\bar{t}, \bar{\alpha}, dQ)$ konvergiert. Die Eigenschaften solcher Limes-Maße fasst das folgende Theorem zusammen:

Theorem 2.2.6 *Sei $j \mapsto Q^{(j)}$ eine in $L^s(G)$, $1 < s \leq \infty$, beschränkte Folge, die gegen ein YOUNG-Maß $\mu = \mu(\bar{t}, \bar{\alpha}, dQ)$ konvergiert. Dann gilt für jede hinreichend reguläre Observable $\Psi = \Psi(Q)$ die folgende schwache Konvergenz in $L^1(G)$:*

$$\Psi(Q^{(j)}) \rightharpoonup [\mu, \Psi],$$

wobei

$$[\mu, \Psi](\bar{t}, \bar{\alpha}) = \int \Psi(Q) \mu(\bar{t}, \bar{\alpha}, dQ). \quad (2.2.41)$$

Welche Ψ im einzelnen zugelassen sind, hängt vom konkreten Wert von s ab (vgl. Anhang B). In jedem Fall sind die Observablen $\Psi(Q) = r$, $\Psi(Q) = v$ und $\Psi(Q) = \Phi'(r)$ zulässig, da diese nur linear im Unendlichen wachsen.

Korollar 2.2.7 *Mit den Bezeichnungen aus Theorem 2.2.6 gilt:*

$$r^{(j)} \rightharpoonup [\mu, r], \quad v^{(j)} \rightharpoonup [\mu, v], \quad p^{(j)} \rightharpoonup [\mu, \Phi']. \quad (2.2.42)$$

Insbesondere gilt

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} [\mu, r] - \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} [\mu, v] = 0, \quad \frac{\partial}{\partial \bar{t}} [\mu, v] - \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} [\mu, \Phi'] = 0. \quad (2.2.43)$$

im Sinne der Distributionen.

Die Verwendung von YOUNG-Maßen scheint zunächst ein vielversprechender Ansatz zu sein, um den Mikro-Makro-Übergang mit Temperatur durchzuführen. Allerdings kennen wir für nichtlineare Wechselwirkungspotentiale nicht die makroskopischen Gleichungen, die die Evolution der Limes-Maße beschreiben. Unsere Strategie wird es daher sein, die Menge der zulässigen Limes-Maße einzuschränken.

Abschließend merken wir an, dass wir Korollar 2.2.7 im Sinne von DIPERNA wie folgt interpretieren können (vgl. dazu etwa [War99] oder [Daf00]): Im thermodynamischen Limes mit Temperatur resultieren maßwertige Lösungen des Systems (2.2.36). Beachte, dass im thermodynamischen Limes für kalte Daten gerade schwache Lösungen von (2.2.36) resultieren. Allerdings ist der Begriff der maßwertigen Lösung im Sinne von DIPERNA sehr schwach, eben weil er die Evolution der Limes-Maße nur sehr unvollständig beschreibt.

2.2.8 Bemerkungen zur harmonischen Kette

Für das harmonische Wechselwirkungspotential, siehe 2.1.4, gilt

$$\Phi'(r) = c_0^2 r. \quad (2.2.44)$$

Deshalb können wir für diesen Fall den Mikro-Makro-Übergang mit Temperatur durchführen. Wir greifen dabei auf die Bezeichnungen des letzten Abschnitts zurück.

Wir betrachten eine Folge $j \mapsto Q^{(j)}$ harmonischer Ketten, deren Anfangsdaten in $L^2([0, 1]; \mathbb{R}^2)$ beschränkt sind. Wir können nun eine Teilfolge auswählen, die auf G gegen ein YOUNG-Maß $\mu = \mu(\bar{t}, \bar{\alpha}, dQ)$ konvergiert. Wir wollen diese Teilfolge wieder mit $j \mapsto Q^{(j)}$ bezeichnen. Außerdem seien $r^{(\infty)}$ bzw. $v^{(\infty)}$ die schwachen Grenzwerte der Folgen

$$j \mapsto r^{(j)} \quad \text{bzw.} \quad j \mapsto v^{(j)}. \quad (2.2.45)$$

Wir können dabei davon ausgehen, dass die schwachen Konvergenzen in $L^2(G)$ gelten. Aus Theorem 2.2.2 bzw. aus Korollar 2.2.7 folgern wir:

Theorem 2.2.8 *Es gilt*

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} r^{(\infty)} - \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} v^{(\infty)} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial \bar{t}} v^{(\infty)} - c_0^2 \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} r^{(\infty)} = 0. \quad (2.2.46)$$

Damit haben wir ein abgeschlossenes System makroskopischer Gleichungen, nämlich die lineare Wellengleichung, abgeleitet. Analoge Aussagen wurden von MIELKE in [Mie04] bewiesen, wobei seine Resultate auch auf allgemeinere atomare Systeme (die aber alle durch lineare Bewegungsgleichungen beschrieben werden) anwendbar sind.

Allerdings beschreibt (2.2.46) den thermodynamischen Limes nur unvollständig, da im Allgemeinen die schwache Konvergenz der Energien, d.h.

$$\frac{1}{2} (v^{(j)})^2 + \frac{c_0^2}{2} (r^{(j)})^2 \rightharpoonup \frac{1}{2} (v^{(\infty)})^2 + \frac{c_0^2}{2} (r^{(\infty)})^2 \quad (2.2.47)$$

nicht (!) erwartet werden kann. Genauer gesagt, (2.2.47) gilt dann und nur dann, wenn schon die entsprechende starke Konvergenz gilt. In diesem Fall gibt es aber gar keine mikroskopischen Oszillationen.

Es sei angemerkt, dass eine vollständige Charakterisierung des thermodynamischen Limes der harmonischen Kette mit Hilfe von WIGNER-Maßen erreicht werden kann. Hierzu verweisen wir auf [Mie04] und [Mac03].

3. Traveling-Waves und ihre Thermodynamik

In diesem Kapitel untersuchen wir eine spezielle Klasse exakter Lösungen der NEWTONschen Bewegungsgleichungen (2.1.3), nämlich die so genannten *Traveling-Waves* oder *laufenden Wellen*. Ausgehend von diesen speziellen Lösungen werden wir im Kapitel 4 approximative Lösungen betrachten, mit deren Hilfe schließlich ein Mikro-Makro-Übergang mit Temperatur gelingen wird.

Da der Terminus „Traveling-Wave“ in der einschlägigen Literatur weit verbreitet ist, wollen wir ihm den Vorzug vor der deutschen „laufenden Welle“ geben.

Im Unterkapitel 3.1 werden wir zunächst den Begriff der Traveling-Wave präzise definieren und die Existenz solcher Lösungen beweisen. Außerdem werden wir wichtige Spezialfälle eingehender untersuchen.

Das Unterkapitel 3.2 ist der Thermodynamik von Traveling-Waves gewidmet, d.h. wir werden untersuchen, wie Traveling-Waves auf der makroskopischen Skala beschrieben werden können. Dabei sind wir vor allem an den *thermodynamischen Zustandsgleichungen* interessiert, da diese in Kapitel 4 eine wichtige Rolle bei Etablierung des Mikro-Makro-Überganges mit Temperatur spielen werden.

Schließlich leiten wir im Unterkapitel 3.3 drei verschiedene numerische Schemata ab, mit denen Traveling-Waves approximativ berechnet werden können, und präsentieren einige numerische Simulationen.

3.1 Traveling-Waves

3.1.1 Definition und abgeleitete Größen

Wir definieren nun den Begriff der Traveling-Wave und betrachten dafür zunächst die unendliche atomare Kette. Später werden wir dann auch periodische Ketten mit $N < \infty$ zulassen.

Eine *Traveling-Wave* ist eine exakte Lösung der NEWTONschen Bewegungsgleichungen (2.1.3), die folgendem Ansatz genügt

$$x_\alpha(t) = r\alpha + vt + \mathbb{X}(k\alpha + \omega t). \quad (3.1.1)$$

Hierbei sind r , v , k und ω vier konstante Parameter, und \mathbb{X} ist das so genannte *Wellenprofil*. Motiviert durch ihre physikalische Interpretation nennen wir r den *mittleren* Abstand, v die *mittlere* Geschwindigkeit, k die *Wellenzahl*, ω die *Frequenz* und $\varphi = k\alpha + \omega t$ die *Phase*. Wir führen zwei weitere Profildfunktionen \mathbb{R} und \mathbb{V} wie folgt ein:

$$\mathbb{V}(\varphi) = \frac{d}{d\varphi} \mathbb{X}(\varphi), \quad \mathbb{R}(\varphi) = \mathbb{X}(\varphi + k/2) - \mathbb{X}(\varphi - k/2). \quad (3.1.2)$$

Für die atomaren Abstände und Geschwindigkeiten in einer Traveling-Wave erhalten wir damit

$$\begin{aligned} r_\alpha(t) &= r + \mathbb{R}(k\alpha + \omega t + k/2), \\ v_\alpha(t) &= v + \omega \mathbb{V}(k\alpha + \omega t). \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

Daher wollen wir \mathbb{R} bzw. \mathbb{V} die *Traveling-Distance-Wave* bzw. die *Traveling-Velocity-Wave* nennen.

Natürlich liefert der Ansatz (3.1.1) nicht für jede Profildfunktion \mathbb{X} eine Lösung von (2.1.3), d.h. die NEWTONschen Gleichungen führen zu Bedingungen für das Wellenprofil \mathbb{X} . Setzen wir den Ansatz (3.1.1) in die NEWTONschen Gleichungen (2.1.3) ein, so erhalten wir die folgende Differenzen-Differentialgleichung:

$$\begin{aligned} \omega^2 \frac{d^2}{d\varphi^2} \mathbb{X}(\varphi) &= \Phi' \left(r + \mathbb{X}(\varphi + k) - \mathbb{X}(\varphi) \right) - \\ &\quad \Phi' \left(r + \mathbb{X}(\varphi) - \mathbb{X}(\varphi - k) \right). \end{aligned} \quad (3.1.4)$$

Beachte, dass auf Grund der GALILEI-Invarianz der Gleichung (2.1.3) die mittlere Geschwindigkeit v nicht in dieser Gleichung auftritt. Daher ist v ein freier Parameter, der ohne Einschränkung auf Null gesetzt werden könnte. Für spätere Zwecke ist es jedoch sinnvoll, diesen zusätzlichen Freiheitsgrad v explizit zu betrachten. Wir können die Gleichung (3.1.4) auch wie folgt schreiben

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varphi} \mathbb{R}(\varphi) &= \mathbb{V}(\varphi + k/2) - \mathbb{V}(\varphi - k/2), \\ \omega^2 \frac{d}{d\varphi} \mathbb{V}(\varphi) &= \Phi' \left(r + \mathbb{R}(\varphi + k/2) \right) - \Phi' \left(r + \mathbb{R}(\varphi - k/2) \right). \end{aligned} \quad (3.1.5)$$

Es gibt zwei große Unterklassen von Traveling-Waves, die sich dadurch unterscheiden, welche Wellenprofile \mathbb{X} zugelassen werden:

1. *Periodische* Traveling-Waves, in denen \mathbb{R} und \mathbb{V} periodisch mit Periode φ_{per} sind.
2. *Lokalisierte* Traveling-Waves, in denen sowohl \mathbb{R} als auch \mathbb{V} lokalisiert sind, d.h. für $\varphi \rightarrow \pm\infty$ hinreichend schnell abklingen.

Lokalisierte Traveling-Waves beschreiben atomare Ketten, die zu jeder Zeit außerhalb eines beschränkten Gebietes (fast) homogen sind.

Wir wollen ausschließlich periodische Traveling-Waves betrachten, denn nur diese entwickeln auf der makroskopischen Skala Temperatur. Außerdem können periodische Traveling-Waves auch in periodischen Ketten mit $N < \infty$ definiert werden, wobei dann natürlich kN ein Vielfaches der Periode φ_{per} sein muss.

Da die Periodenlänge φ_{per} einer Traveling-Wave letztlich beliebig gewählt werden kann, wollen wir ihren Wert auf 1 setzen, d.h. von jetzt ab gilt $\varphi_{\text{per}} = 1$. Außerdem können wir ohne Einschränkung voraussetzen, dass die folgenden Identitäten gelten:

$$\int_0^1 \mathbb{X}(\varphi) d\varphi = \int_0^1 \mathbb{V}(\varphi) d\varphi = \int_0^1 \mathbb{R}(\varphi) d\varphi = 0. \quad (3.1.6)$$

Insbesondere ist \mathbb{X} selbst schon 1-periodisch. Beachte, dass auf Grund von (3.1.6) eine Traveling-Wave bereits vollständig durch ihre Traveling-Velocity-Wave bestimmt ist. So gilt etwa

$$\mathbb{R}(\varphi) = \int_{\varphi-k/2}^{\varphi+k/2} \mathbb{V}(\varphi') d\varphi'. \quad (3.1.7)$$

Da α diskret und \mathbb{X} 1-periodisch ist, können wir nicht zwischen zwei Wellenzahlen k_1 und k_2 mit $k_2 - k_1 = 1$ unterscheiden. Außerdem bemerken wir, dass für $k = 0$ die Differenz-Differentialgleichungen (3.1.4) und (3.1.5) entarten. Sofern wir nicht ausdrücklich davon abweichen, wollen wir daher im Folgenden stets nur Wellenzahlen $k \in (0, 1)$ betrachten.

Wenn wir die Traveling-Wave-Parameter (r, v, k, ω) fixieren, so beschreiben periodische Traveling-Waves Lösungen der atomaren Kette mit starken mikroskopischen Oszillationen, wobei auf der mikroskopischen Skala sowohl die räumliche als auch die zeitliche Periode nicht von der Teilchenzahl N abhängen. Auf der makroskopischen Skala hingegen ist die Periodenlänge von der Ordnung $\mathcal{O}(\varepsilon)$. Im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ können wir daher nur Mittelwerte atomarer Größen beobachten, die allerdings räumlich und zeitlich homogen sind. Folgende Mittelwerte haben eine unmittelbare physikalische Interpretation:

$$\begin{aligned} W &:= \int_0^1 \Phi(r + \mathbb{R}(\varphi)) d\varphi, & \text{spezifische innere potentielle Energiedichte,} \\ p &:= - \int_0^1 \Phi'(r + \mathbb{R}(\varphi)) d\varphi, & \text{Druck = negative spezifische Kraftdichte,} \\ K &:= \frac{\omega^2}{2} \int_0^1 \mathbb{V}(\varphi)^2 d\varphi, & \text{spezifische innere kinetische Energiedichte,} \\ T &:= 2K, & \text{kinetische Temperatur,} \\ F &:= K - W, & \text{spezifische innere Wirkungsichte,} \\ U &:= K + W, & \text{spezifische innere Energiedichte,} \\ E &:= \frac{1}{2}v^2 + U, & \text{spezifische Energiedichte.} \end{aligned}$$

Die Größen W , U , K , E und F sind spezifische Dichten, da sie den Mittelwert pro Teilchen, d.h. pro Masse beschreiben. Die additiven Dichten treten hier nicht auf, da wir uns nur im LAGRANGE-Bild und nicht im EULER-Bild der Thermodynamik bewegen. Wir merken jedoch an, dass die additiven Dichten formal durch ϱW , ϱU usw. gegeben sind, wobei $\varrho = 1/r$ die Massendichte ist. Solange keine Missverständnisse möglich sind, wollen wir U einfach die innere Energie, W die innere potentielle Energie usw. nennen. Weiterhin setzen wir

$$\begin{aligned}\gamma &:= \frac{1}{2} \int_0^1 \mathbb{V}(\varphi)^2 d\varphi, \\ S &:= 2\omega\gamma, \\ g &:= - \int_0^1 \frac{1}{2} (\mathbb{V}(\varphi + k/2) + \mathbb{V}(\varphi - k/2)) \Phi'(r + \mathbb{R}(\varphi)) d\varphi.\end{aligned}$$

Die Größe γ besitzt keine physikalische Bedeutung; sie ist lediglich als Abkürzung eingeführt. Den Größen S und g jedoch werden wir im weiteren Verlauf eine physikalische Bedeutung geben, indem wir S als (*spezifische*) *Entropiedichte* und g als den *Entropiefluss* interpretieren. Obwohl wir diese Interpretation erst später in den Abschnitten 3.2.7 und 4.2.2 ausführlich begründen werden, wollen wir die o.g. Bezeichnungen für S und g schon jetzt verwenden.

3.1.2 Existenz von Traveling-Waves

Die Existenz von Traveling-Waves für die nichtlineare atomare Kette bzw. für andere diskrete Systeme ist ein im Allgemeinen sehr schwieriges Problem, da die Profilkfunktionen als Lösungen von Differenzen-Differentialgleichungen bestimmt werden müssen. Die Existenz von Traveling-Waves in diskreten Systemen wurde von vielen Autoren mit Hilfe unterschiedlicher Methoden untersucht: Vergleiche etwa [FW94], [Ioo00], [FM02], [FV99], [PP00] für die atomare Kette, [IK00] für die harmonische Kette mit äußerem Potential und [FM03] für die zweidimensionale Kette.

Wir werden uns auf *konvexe* Wechselwirkungspotentiale Φ beschränken und zeigen zunächst, dass Traveling-Velocity-Waves als Lösungen eines geeigneten Optimierungsproblems mit Nebenbedingung konstruiert werden können. Für dieses Optimierungsproblem kann dann die Existenz von Lösungen vergleichsweise einfach bewiesen werden, wobei die Konvexität des Potentials Φ sehr entscheidend sein wird. Dieser Zugang zum Existenzproblem für Traveling-Waves der nichtlinearen atomaren Kette wurde erstmals von FILIP und VENAKIDES in [FV99] beschrieben.

Wir nehmen innerhalb dieses Abschnitts an, dass das atomare Wechselwirkungspotential Φ den Annahmen 2.1.1 und 2.1.2 aus Abschnitt 2.1.2 genügt, so dass im Folgenden Φ eine glatte, überall definierte und strikt konvexe Funktion ist, deren zweite Ableitung darüber

hinaus den Abschätzungen (2.1.6) genügt, d.h. es gilt

$$0 < m \leq \Phi'' \leq M < \infty. \quad (3.1.8)$$

Dabei ist die Voraussetzung 2.1.2 im Wesentlichen nur technischer Natur und nicht im Problem selbst begründet. Wir werden das am Ende dieses Abschnitts ausführlicher diskutieren.

Innerhalb dieses Abschnitts verwenden wir an mehreren Stellen einige wohlbekannte Sätze und Methoden der linearen bzw. nichtlinearen Funktionalanalysis, ohne dabei immer explizit eine Referenz anzugeben. Für eine detaillierte Darstellung dieser Sätze und Methoden verweisen wir auf die einschlägige Literatur, wie zum Beispiel [Zei86], [DL88] oder [Ruz04].

3.1.2.1 Funktionalanalytisches Setting

Im Folgenden identifizieren wir stets eine 1-periodische Funktion mit ihrer Restriktion auf das Einheitsintervall $[0, 1]$. Umgekehrt denken wir uns jede Funktion, die auf dem Einheitsintervall gegeben ist, als 1-periodisch auf die gesamte reelle Achse fortgesetzt. Wir sagen, eine 1-periodische Funktion \mathbb{V} ist Element von $L^p([0, 1])$, $1 \leq p \leq \infty$, wenn ihre Einschränkung auf das Einheitsintervall in $L^p([0, 1])$ liegt. Das Skalarprodukt in $L^2([0, 1])$ schreiben wir als

$$\langle \mathbb{V}_1, \mathbb{V}_2 \rangle = \int_0^1 \mathbb{V}_1(\varphi) \mathbb{V}_2(\varphi) d\varphi. \quad (3.1.9)$$

Die Regularitätsannahme 2.1.2 impliziert, dass der nichtlineare Operator

$$\partial\Phi : L^2([0, 1]) \rightarrow L^2([0, 1]), \quad (\partial\Phi\mathbb{V})(\varphi) := \Phi'(\mathbb{V}(\varphi)). \quad (3.1.10)$$

wohldefiniert ist. Für jedes $k \in (0, 1)$ definieren wir zwei Integraloperatoren A_k und \hat{A}_k durch

$$(A_k\mathbb{V})(\varphi) := \int_{\varphi-k/2}^{\varphi+k/2} \mathbb{V}(\varphi') d\varphi', \quad \hat{A}_k\mathbb{V} := A_k\mathbb{V} - k \int_0^1 \mathbb{V}(\varphi') d\varphi'. \quad (3.1.11)$$

Außerdem setzen wir

$$B_k = \partial_k A_k, \quad \text{d.h.} \quad (B_k\mathbb{V})(\varphi) := \frac{1}{2}(\mathbb{V}(\varphi + k/2) + \mathbb{V}(\varphi - k/2)). \quad (3.1.12)$$

Die Traveling-Wave-Gleichungen (3.1.4) bzw. (3.1.5) können nun äquivalent in eine Integralgleichung umgeformt werden, in der nur noch die Profilfunktion \mathbb{V} als Unbekannte vorkommt:

$$\omega^2 \mathbb{V} = \hat{A}_k \partial\Phi(r + \hat{A}_k \mathbb{V}). \quad (3.1.13)$$

Die entsprechende Traveling-Distance-Wave \mathbb{R} ergibt sich dann aus

$$\mathbb{R} = \hat{A}_k \mathbb{V}. \quad (3.1.14)$$

Im nächsten Abschnitt werden wir sehen, dass mit dieser Formulierung das Existenzproblem für Traveling-Waves gelöst werden kann.

3.1.2.2 Existenzresultat

In diesem Abschnitt werden wir unser Existenzresultat für Traveling-Waves formulieren. Dazu führen wir zunächst ein Optimierungsproblem mit Nebenbedingung ein und zeigen, dass die entsprechenden Lösungen Traveling-Velocity-Waves sind.

Definition 3.1.1 *Für alle r und $k \in (0, 1)$ definieren wir ein Funktional \mathcal{W} auf $L^2([0, 1])$ wie folgt:*

$$\mathcal{W}(r, k, \mathbb{V}) := \int_0^1 \Phi\left(r + \hat{A}_k \mathbb{V}(\varphi)\right) d\varphi. \quad (3.1.15)$$

Beachte, dass die Integrierbarkeit der rechten Seite von (3.1.15) gesichert ist, sie dazu das Lemma 3.1.5.

Problem 3.1.2 *Für gegebene $r, k \in (0, 1)$ und $\gamma > 0$ maximieren wir das Funktional*

$$\mathbb{V} \in L^2([0, 1]) \rightarrow \mathcal{W}(r, k, \mathbb{V}) \quad (3.1.16)$$

unter der Nebenbedingung $\mathbb{V} \in H_\gamma$, wobei

$$H_\gamma := \left\{ \mathbb{V} \in L^2([0, 1]) : \frac{1}{2} \int_0^1 \mathbb{V}(\varphi)^2 d\varphi \leq \gamma \right\}. \quad (3.1.17)$$

Theorem 3.1.3 *Für jedes r , alle $k \in (0, 1)$ und beliebiges $\gamma > 0$ existiert stets ein Maximierer $\tilde{\mathbb{V}}$ von Problem 3.1.2, so dass gilt:*

1. $\tilde{\mathbb{V}}$ ist Element des Randes von H_γ , d.h.

$$\frac{1}{2} \int_0^1 \tilde{\mathbb{V}}(\varphi)^2 d\varphi = \gamma. \quad (3.1.18)$$

2. Es existiert ein positiver LAGRANGE-Multiplikator $\tilde{\omega}^2$, so dass $\tilde{\mathbb{V}}$ eine Traveling-Velocity-Wave mit Frequenz $\tilde{\omega}$ ist, d.h.

$$\tilde{\omega}^2 \tilde{\mathbb{V}} = \hat{A}_k \partial \Phi\left(r + \hat{A}_k \tilde{\mathbb{V}}\right). \quad (3.1.19)$$

Die Idee, Traveling-Velocity-Waves als Maximierer von 3.1.2 zu konstruieren, geht auf FILIP und VENAKIDES zurück, vgl. dazu [FV99]. Im Folgenden werden wir einen Beweis für Theorem 3.1.3 angeben, der einige Argumente aus [FV99] vereinfacht.

3.1.2.3 Beweis des Existenzresultates

Wir beginnen mit den Eigenschaften des nichtlinearen Operators $\partial\Phi$ sowie der linearen Operatoren A_k und \hat{A}_k .

Bemerkung 3.1.4 *Der Operator $\partial\Phi$ ist stark monoton mit Konstante m und LIPSCHITZ-stetig mit Konstante M , wobei m und M die Konstanten aus Annahme 2.1.2 sind.*

Beweis: Die Behauptungen folgen unmittelbar aus der Konvexität von Φ und aus den Abschätzungen (2.1.6) bzw. (3.1.8). \square

Lemma 3.1.5 *Sei $k \in (0, 1)$ gegeben. Die Operatoren A_k und \hat{A}_k bilden den Raum $L^2([0, 1])$ in sich ab und besitzen folgende Eigenschaften:*

1. *Sie lassen sich als Faltungsoperatoren schreiben:*

$$A_k \mathbb{V} = \chi_k * \mathbb{V}, \quad \hat{A}_k \mathbb{V} = \hat{\chi}_k * \mathbb{V}, \quad (3.1.20)$$

wobei χ_k die Indikatorfunktion des Intervalls $[-k/2, +k/2]$ ist, und außerdem $\hat{\chi}_k = \chi_k - k$ gilt.

2. *Sie bilden $L^2([0, 1])$ stetig nach $H^1([0, 1])$ und damit nach $C([0, 1])$ ab.*
3. *Es gilt*

$$\|A_k \mathbb{V}\|_\infty \leq \sqrt{k} \|\mathbb{V}\|_2, \quad \|\hat{A}_k \mathbb{V}\|_\infty \leq \sqrt{k(1-k)} \|\mathbb{V}\|_2. \quad (3.1.21)$$

4. *Sie sind stark-stetig, d.h. sie bilden schwach konvergente Folgen in stark konvergente Folgen ab.*
5. *Sie sind kompakt und symmetrisch.*
6. *Jedes $\mathbb{V} \in L^2([0, 1])$ erfüllt*

$$\hat{A}_k \mathbb{V} + \hat{A}_{1-k} S_{1/2} \mathbb{V} = 0, \quad (3.1.22)$$

wobei $S_{1/2}$ definiert ist durch $(S_{1/2} \mathbb{V})(\varphi) = \mathbb{V}(\varphi + 1/2)$.

Beweis: Linearität und Symmetrie von A_k und \hat{A}_k , sowie deren Darstellung als Faltungsoperatoren, folgen direkt aus Definition (3.1.11). Es folgt

$$|(A_k \mathbb{V})(\varphi)| \leq \|\chi_k\|_2 \|\mathbb{V}\|_2, \quad \left| (\hat{A}_k \mathbb{V})(\varphi) \right| \leq \|\hat{\chi}_k\|_2 \|\mathbb{V}\|_2, \quad (3.1.23)$$

und deshalb gelten die Abschätzungen (3.1.21). Für jedes $\mathbb{V} \in L^2([0, 1])$ besitzt die Funktion $A_k \mathbb{V}$ eine schwache Ableitung $\mathbb{V}' \in L^2([0, 1])$ mit

$$\mathbb{V}'(\varphi) = \mathbb{V}\left(\varphi + \frac{k}{2}\right) - \mathbb{V}\left(\varphi - \frac{k}{2}\right). \quad (3.1.24)$$

Sei nun $n \mapsto \mathbb{V}_n$ eine schwach konvergente Folge mit $\mathbb{V}_n \rightharpoonup \mathbb{V}_\infty$. Dann gilt

$$(A_k \mathbb{V}_n)(\varphi) = \langle \chi_k(\varphi - \cdot), \mathbb{V}_n \rangle \rightarrow \langle \chi_k(\varphi - \cdot), \mathbb{V}_\infty \rangle = (A_k \mathbb{V}_\infty)(\varphi)$$

für fast alle φ , d.h. $A_k \mathbb{V}_n$ konvergiert punktweise fast überall gegen $A_k \mathbb{V}_\infty$. Da die Folge $n \mapsto \mathbb{V}_n$ beschränkt ist, liefert (3.1.21), dass $n \mapsto A_k \mathbb{V}_n$ durch eine Konstante majorisiert wird. Insgesamt folgt die starke Konvergenz $A_k \mathbb{V}_n \rightarrow A_k \mathbb{V}_\infty$ und schließlich auch $\hat{A}_k \mathbb{V}_n \rightarrow \hat{A}_k \mathbb{V}_\infty$. Damit ist die Stark-Stetigkeit der Operatoren gezeigt. Es folgt direkt die behauptete Kompaktheit. Die Identität (3.1.22) kann einfach nachgerechnet werden. \square

Die letzten beiden Lemmata implizieren das folgende Regularitätsresultat.

Lemma 3.1.6 *Jede Lösung \mathbb{V} von (3.1.13) mit $\omega \neq 0$ ist \mathcal{C}^2 -glatt.*

Beweis: Sei $\mathbb{Y} = \partial\Phi(r + \hat{A}_k \mathbb{V})$. Aus den Annahmen 2.1.1 und 2.1.2 sowie aus Lemma 3.1.5 folgt schrittweise:

1. $\hat{A}_k \mathbb{Y}$ ist stetig, da aus $H^1([0, 1])$, d.h. auch \mathbb{V} ist stetig.
2. $\hat{A}_k \mathbb{V}$ ist \mathcal{C}^1 -glatt, da die Ableitung durch (3.1.24) gegeben ist.
3. \mathbb{Y} ist \mathcal{C}^1 -glatt.
4. $\hat{A}_k \mathbb{Y}$ ist \mathcal{C}^2 -glatt, wegen (3.1.24) für \mathbb{Y} . \square

Die Eigenschaften des Funktionals \mathcal{W} aus Definition 3.1.1 werden durch das Wechselwirkungspotential Φ und den Faltungsoperator \hat{A}_k bestimmt.

Lemma 3.1.7 *Das Funktional \mathcal{W} aus Definition 3.1.1 ist differenzierbar bzgl. seiner Parameter r und k . Bezüglich der Variablen \mathbb{V} ist \mathcal{W} konvex, stetig in der schwachen Topologie und GATEAUX-differenzierbar mit monotoner und kompakter Ableitung*

$$\partial_{\mathbb{V}} \mathcal{W}(r, k, \mathbb{V}) = \hat{A}_k \partial\Phi(r + \hat{A}_k \mathbb{V}). \quad (3.1.25)$$

Beweis: Alle Behauptungen über Differenzierbarkeit folgen unmittelbar aus Definition 3.1.1. Die Monotonie von $\partial_{\mathbb{V}} \mathcal{W}$ bzgl. \mathbb{V} ist direkte Konsequenz der Monotonie von $\partial\Phi$ sowie der Symmetrie von \hat{A}_k und impliziert die Konvexität von \mathcal{W} bzgl. \mathbb{V} . Die Stetigkeit von \mathcal{W} in der schwachen Topologie folgt aus der Stark-Stetigkeit von \hat{A}_k . Die Kompaktheit von $\partial_{\mathbb{V}} \mathcal{W}(r, k, \mathbb{V})$ ergibt sich aus der Kompaktheit von \hat{A}_k und der Stetigkeit von $\partial\Phi$. \square

Schließlich können wir die Konvexität von \mathcal{W} in Form von Ungleichungen ausdrücken.

Lemma 3.1.8 *Seien \mathbb{V}_1 und \mathbb{V}_2 zwei Funktionen aus $L^2([0, 1])$, und seien W_1, W_2 definiert durch $W_i = \mathcal{W}(r, k, \mathbb{V}_i)$, $i = 1, 2$. Dann gilt*

$$W_2 - W_1 \geq \langle \partial_{\mathbb{V}} \mathcal{W}(r, k, \mathbb{V}_1), \mathbb{V}_2 - \mathbb{V}_1 \rangle + \frac{m}{2} \|\hat{A}_k \mathbb{V}_2 - \hat{A}_k \mathbb{V}_1\|^2,$$

wobei m die Monotonie-Konstante von $\partial\Phi$ ist.

Beweis: Im Folgenden schreiben wir $\mathcal{W}(\mathbb{V})$ an Stelle von $\mathcal{W}(r, k, \mathbb{V})$. Auf Grund der GATEAUX-Differenzierbarkeit von \mathcal{W} (bzgl. \mathbb{V}) und der Monotonie von $\partial_{\mathbb{V}}\mathcal{W}$ gilt

$$\begin{aligned}
W_2 - W_1 &= \int_0^1 \langle \partial_{\mathbb{V}}\mathcal{W}(\lambda\mathbb{V}_2 + (1-\lambda)\mathbb{V}_1), \mathbb{V}_2 - \mathbb{V}_1 \rangle \, d\lambda \\
&= \int_0^1 \frac{1}{\lambda} \langle \partial_{\mathbb{V}}\mathcal{W}(\lambda\mathbb{V}_2 + (1-\lambda)\mathbb{V}_1) - \partial_{\mathbb{V}}\mathcal{W}(\mathbb{V}_1), \lambda(\mathbb{V}_2 - \mathbb{V}_1) \rangle \, d\lambda \\
&\quad + \int_0^1 \langle \partial_{\mathbb{V}}\mathcal{W}(\mathbb{V}_1), \mathbb{V}_2 - \mathbb{V}_1 \rangle \, d\lambda \\
&\geq \int_0^1 m\lambda \|\hat{A}_k\mathbb{V}_2 - \hat{A}_k\mathbb{V}_1\|^2 \, d\lambda + \langle \partial_{\mathbb{V}}\mathcal{W}(\mathbb{V}_1), \mathbb{V}_2 - \mathbb{V}_1 \rangle \\
&\geq \frac{m}{2} \|\hat{A}_k\mathbb{V}_2 - \hat{A}_k\mathbb{V}_1\|^2 + \langle \partial_{\mathbb{V}}\mathcal{W}(\mathbb{V}_1), \mathbb{V}_2 - \mathbb{V}_1 \rangle, \tag{3.1.26}
\end{aligned}$$

und das Lemma ist bewiesen. \square

Korollar 3.1.9 *Seien r und $k \in (0, 1)$ gegeben. Dann gilt sowohl*

$$\mathcal{W}(r, k, \mathbb{V}) \geq \frac{m}{2} \|\hat{A}_k\mathbb{V}\|^2 + \mathcal{W}(r, k, 0) \tag{3.1.27}$$

als auch die Doppelabschätzung

$$\begin{aligned}
0 &\leq \mathcal{W}(r, k, \mathbb{V}) - \mathcal{W}(r, k, 0) + \frac{m}{2} \|\hat{A}_k\mathbb{V}\|^2 \\
&\leq \langle \partial_{\mathbb{V}}\mathcal{W}(r, k, \mathbb{V}), \mathbb{V} \rangle. \tag{3.1.28}
\end{aligned}$$

Beweis: Lemma 3.1.8, mit $\mathbb{V}_1 = 0$ und $\mathbb{V}_2 = \mathbb{V}$, liefert (3.1.27). (3.1.28) folgt aus (3.1.27) und Lemma 3.1.8 mit $\mathbb{V}_1 = \mathbb{V}$ und $\mathbb{V}_2 = 0$. \square

Nun können wir das Existenzresultat 3.1.3 beweisen.

Beweis von Theorem 3.1.3: Das Funktional (3.1.16) ist schwach stetig auf der schwach kompakten Menge H_γ . Deshalb existiert ein Maximierer $\tilde{\mathbb{V}}$ in H_γ . Da (3.1.16) darüber hinaus konvex ist, liegt der Maximierer $\tilde{\mathbb{V}}$ auf dem Rand von H_γ , denn andernfalls wäre er ein stationärer Punkt. Stationäre Punkte konvexer Funktionale sind aber Minimierer, vgl. die Abschätzung (3.1.26).

Weiterhin wissen wir, dass ein positiver LAGRANGE-Multiplikator $\lambda > 0$ existiert, so dass

$$\lambda \partial_{\mathbb{V}}\mathcal{W}(r, k, \mathbb{V}) = \partial_{\mathbb{V}}\Gamma(\mathbb{V}), \tag{3.1.29}$$

wobei

$$\Gamma(\mathbb{V}) = \frac{1}{2} \int_0^1 \mathbb{V}(\varphi)^2 \, d\varphi. \tag{3.1.30}$$

Mit $\tilde{\omega} := \sqrt{\lambda}$ und (3.1.25) folgt schließlich (3.1.19). \square

Der Maximierer $\tilde{\mathbb{V}}$ aus Theorem 3.1.3 ist nicht eindeutig, da jeder Shift von $\tilde{\mathbb{V}}$ auch ein Maximierer ist. Es bleibt offen, ob dies die einzige Mehrdeutigkeit des Maximierers ist. Ebenso können wir nicht entscheiden, ob der Wert der Frequenz $\tilde{\omega}$ vom Maximierer abhängt oder nicht.

3.1.2.4 Diskussion

Wir haben bewiesen, dass Traveling-Velocity-Waves als Lösungen von 3.1.2 existieren. Dabei sind wir von zwei Annahmen ausgegangen:

1. Das Wechselwirkungspotential Φ ist konvex.
2. Das Wechselwirkungspotential Φ erfüllt Annahme 2.1.2.

Die erste Annahme ist wesentlich in folgendem Sinne: Falls wir nichtkonvexe Potentiale Φ zulassen, so ist das Optimierungsproblem 3.1.16 zwar immer noch gut gestellt, denn die Kompaktheit von \hat{A}_k impliziert noch immer die schwache Stetigkeit von \mathcal{W} bzgl. \mathbb{V} . Insbesondere gibt es auch in diesem Fall Maximierer $\tilde{\mathbb{V}}$. Weil aber \mathcal{W} nicht mehr konvex ist, können wir keine Aussage darüber gewinnen, ob die Maximierer im Inneren von H_γ oder aber auf dem Rand ∂H_γ liegen. Daher können wir nicht die Existenz eines LAGRANGE-Multiplikators $\omega^2 \neq 0$ beweisen. Auf der anderen Seite können wir aber auch nicht a priori die Maximierer auf den Rand ∂H_γ beschränken, denn ∂H_γ ist, im Gegensatz zu H_γ , nicht schwach kompakt. Insgesamt scheint es fraglich, ob der hier gegebene Existenzbeweis auf nichtkonvexe Potentiale übertragbar ist.

Die zweite Annahme ist im Gegensatz zur ersten nicht wesentlich. Denn sei Φ ein glattes und strikt konvexes atomares Wechselwirkungspotential, das entweder nicht überall definiert ist, oder dessen zweite Ableitung nicht (3.1.8) erfüllt. Sei nun $\mathbb{V} \in H_\gamma$ eine Lösung von (3.1.13) und sei $\mathbb{R} = \hat{A}_k \mathbb{V}$ die entsprechende Traveling-Distance-Wave. Mit (3.1.21) gilt die A-priori Abschätzung $\|\mathbb{R}\|_\infty \leq \sqrt{2\gamma} =: \mu_\gamma$. In Abhängigkeit von γ können wir nun Φ außerhalb von $I_\gamma := [-\mu_\gamma, \mu_\gamma]$ so abändern, dass das modifizierte Potential Φ_γ die Annahme 2.1.2 erfüllt. Die Existenz einer Traveling-Velocity-Wave \mathbb{V} kann nun mit Theorem 3.1.3 für das Potential Φ_γ bewiesen werden. Nach Konstruktion ist \mathbb{V} auch Traveling-Velocity-Wave für Φ .

3.1.3 Beispiele

Im Folgenden werden wir für die speziellen atomaren Wechselwirkungspotentiale aus Abschnitt 2.1.4 explizite Ausdrücke für Traveling-Waves angeben. Wir werden uns dabei auf die Traveling-Velocity-Waves \mathbb{V} konzentrieren. Die entsprechenden Traveling-Distance-Waves \mathbb{R} sowie die dazu gehörenden Traveling-Wave-Profile \mathbb{X} ergeben sich dann durch einfache Transformationen.

In Abhängigkeit vom Wechselwirkungspotential werden wir unterschiedliche Parameter verwenden, um die Traveling-Waves zu charakterisieren. Um die Abhängigkeit von den

Parametern deutlich von der Abhängigkeit von der Phasenvariable φ zu unterscheiden, schreiben wir

$$\mathbb{V}(\vec{u}; \varphi), \quad (3.1.31)$$

wobei \vec{u} für einen Satz von gewissen Parametern steht.

Modell A: Die harmonische Kette

Es ist einfach zu zeigen, dass für die harmonische Kette Traveling-Waves wie folgt konstruiert werden können: Für gegebene r und γ definieren wir

$$\mathbb{V}(\gamma; \varphi) = 2\sqrt{\gamma} \sin(2\pi\varphi), \quad (3.1.32)$$

$$\mathbb{R}(k, \gamma; \varphi) = \frac{\sin(\pi k)}{\pi} \mathbb{V}(\gamma; \varphi). \quad (3.1.33)$$

Beachte, dass \mathbb{V} nicht von der Wellenzahl k abhängt. Die Frequenz ω kann für das harmonische Potential nicht frei gewählt werden, sondern ergibt sich aus der Wellenzahl k mittels der *harmonischen Dispersionsrelation*

$$\omega = \omega(k) = \frac{c_0 \sin(\pi k)}{\pi}. \quad (3.1.34)$$

Wir können nun alle physikalischen Felder als Funktionen von (r, k, γ) ausdrücken. Das führt zu den folgenden Identitäten:

$$\begin{aligned} W(r, k, \gamma) &= \frac{1}{2} c_0^2 r^2 + \omega(k)^2 \gamma, \\ F(r, k, \gamma) &= -\frac{1}{2} c_0^2 r^2, \\ U(r, k, \gamma) &= \frac{1}{2} c_0^2 r^2 + 2\omega(k)^2 \gamma, \\ S(r, k, \gamma) &= 2\omega(k) \gamma \end{aligned} \quad (3.1.35)$$

und weiter

$$\begin{aligned} p(r, k, \gamma) &= -c_0^2 r, \\ g(r, k, \gamma) &= -c_0^2 \sin(2\pi k) \gamma. \end{aligned} \quad (3.1.36)$$

Modell B: Das Billard-Modell

Obwohl das diesem Modell zu Grunde liegende Potential nicht glatt ist, lässt sich auch hier der Begriff der Traveling-Wave analog zu (3.1.1) einführen. Wir müssen aber \mathbb{X} so bestimmen, dass der Ansatz (3.1.1) der mikroskopischen Dynamik genügt, wie sie im Abschnitt 2.1.4 beschrieben wurde.

Mit Hilfe einiger elementarer Überlegungen lässt sich leicht zeigen, dass folgende Ausdrücke eine Familie von Traveling-Velocity-Waves für Modell B definieren:

$$\mathbb{V}(r, k; \varphi) = \begin{cases} -\frac{(r-r_0)}{k} & \text{falls } 0 \leq \varphi < k \\ +\frac{(r-r_0)}{1-k} & \text{falls } k \leq \varphi < 1 \end{cases}, \quad (3.1.37)$$

wobei $r > r_0$ und k freie Parameter sind. Außerdem kann die Frequenz $\omega > 0$ beliebig gewählt werden, d.h. für Modell B gibt es keine Dispersionsrelation.

Schließlich resultieren alle physikalischen Größen als Funktionen von r , k und ω . Es gilt

$$\begin{aligned}
 F(r, k, \omega) &= \frac{(r - r_0)^2 \omega^2}{2k(1 - k)} \\
 S(r, k, \omega) &= \frac{(r - r_0)^2 \omega}{k(1 - k)}, \\
 \gamma(r, k, \omega) &= \frac{(r - r_0)^2}{2k(1 - k)}, \\
 p(r, k, \omega) &= \frac{(r - r_0) \omega^2}{k(1 - k)}, \\
 g(r, k, \omega) &= \frac{(r - r_0)^2 \omega^2 (2k - 1)}{2k^2(1 - k)^2}.
 \end{aligned} \tag{3.1.38}$$

Da es für Modell B keine innere potentielle Energie gibt, gilt $W = 0$ und damit $U = F = K$.

Modell C : Kollisionen im harmonischen Potential

In diesem Abschnitt beschreiben wir eine Familie von Traveling-Waves für das Modell C . Für eine gegebene Frequenz $\omega > 0$ setzen wir

$$\sigma(\omega) = \frac{\pi\omega}{\delta}, \tag{3.1.39}$$

d.h. σ ist die mit ω skalierte Kollisionszeit im Elementar-Problem, vgl. dazu Abschnitt 2.1.4. Weiterhin definieren wir eine 1-periodische Hilfsfunktion \tilde{V} durch

$$\tilde{V}(k, \omega; \varphi) = \begin{cases} +\cos(\sigma^{-1}\pi\varphi) & \text{falls } 0 \leq \varphi \leq \sigma, \\ -1 & \text{falls } \sigma \leq \varphi \leq k, \\ -\cos(\sigma^{-1}\pi(\varphi - k)) & \text{falls } k \leq \varphi \leq k + \sigma, \\ +1 & \text{falls } k + \sigma \leq \varphi \leq 1, \end{cases} \tag{3.1.40}$$

wobei $\sigma = \sigma(\omega)$. Nun können wir eine Familie von Traveling-Velocity-Waves wie folgt einführen:

$$\mathbb{V}(r, k, \omega; \varphi) = \frac{r - r_0}{2k(1 - k) - \sigma(\omega)} \left(\tilde{V}(\varphi) - (1 - 2k) \right). \tag{3.1.41}$$

Die entsprechende Familie von Traveling-Distance-Waves ergibt sich aus

$$\mathbb{R}(r, k, \omega; \cdot) = \hat{A}_k \mathbb{V}(r, k, \omega; \cdot). \tag{3.1.42}$$

Es kann leicht gezeigt werden, dass der Ansatz (3.1.41) der Traveling-Wave-Gleichung genügt, sofern ω hinreichend klein ist, d.h. es muss gelten

$$\sigma(\omega) = \pi\delta^{-1}\omega \leq \min\{k, 1 - k\}. \tag{3.1.43}$$

Diese Bedingung sichert, dass alle atomaren Wechselwirkungen allein durch das Elementar-Problem beschrieben werden. Mit anderen Worten, solange ein atomarer Abstand r_α kleiner

als r_0 ist, solange sind die benachbarten Abstände $r_{\alpha-1}$ und $r_{\alpha+1}$ größer als r_0 . Wir bemerken, dass es auch Traveling-Waves gibt, die die Bedingung (3.1.43) nicht erfüllen, aber für diese werden die expliziten Ausdrücke wesentlich komplizierter.

Schließlich erhalten wir

$$\begin{aligned}
 F(r, k, \omega) &= \frac{(r - r_0)^2 \omega^2}{2k(1 - k) - \sigma(\omega)}, \\
 S(r, k, \omega) &= \frac{(r - r_0)^2 \omega (4k(1 - k) - \sigma(\omega))}{(2k(1 - k) - \sigma(\omega))^2}, \\
 \gamma(r, k, \omega) &= \frac{(r - r_0)^2 (4k(1 - k) - \sigma(\omega))}{2(2k(1 - k) - \sigma(\omega))^2}, \\
 p(r, k, \omega) &= \frac{2(r - r_0) \omega^2}{2k(1 - k) - \sigma(\omega)}, \\
 g(r, k, \omega) &= \frac{(r - r_0)^2 \omega^2 (2k - 1)}{(2k(1 - k) - \sigma(\omega))^2}.
 \end{aligned} \tag{3.1.44}$$

Beachte, dass Modell C im Limes $\sigma \rightarrow 0$, d.h. $\omega \rightarrow 0$, mit dem Modell B übereinstimmt.

3.1.4 Binäre Oszillationen

Für ein beliebiges Wechselwirkungspotential Φ ist es ein nicht-triviales und im Allgemeinen sehr schwieriges Problem, die Lösungen der Gleichungen (3.1.4) und (3.1.5) bzw. des Optimierungsproblems 3.1.2 entweder explizit anzugeben, oder ihre qualitative Eigenschaften zu charakterisieren. Es gibt jedoch einen Fall, in dem die Gleichung (3.1.5) wesentlich vereinfacht werden kann. Dies ist der Fall $k = 1/2$.

Lemma 3.1.10 *Für $k = 1/2$ ist das System (3.1.5) äquivalent zu folgendem System gewöhnlicher Differentialgleichungen:*

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{d\tau} R(\tau) &= + \frac{\partial H_{\text{osz}}}{\partial V}(V(\tau), R(\tau)), \\
 \frac{d}{d\tau} V(\tau) &= - \frac{\partial H_{\text{osz}}}{\partial R}(V(\tau), R(\tau)).
 \end{aligned} \tag{3.1.45}$$

Hierbei sind die Funktionen R und V gegeben durch

$$V(\tau) = \omega \mathbb{V}(\omega\tau/2), \quad R(\tau) = \mathbb{R}(\omega\tau/2 - 1/4), \tag{3.1.46}$$

und die Oszillatorenergie H_{osz} ist definiert als

$$\begin{aligned}
 H_{\text{osz}}(V, R) &= \frac{1}{2} V^2 + \Phi_{\text{osz}}(R), \\
 \Phi_{\text{osz}}(R) &= \frac{1}{2} \Phi(r + R) + \frac{1}{2} \Phi(r - R).
 \end{aligned} \tag{3.1.47}$$

Beweis: Das System (3.1.5) mit $k = 1/2$ liefert auf Grund der 1-Periodizität der Profilkfunktionen

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\varphi}(\mathbb{R}(\varphi + 1/2) + \mathbb{R}(\varphi)) &= 0, \\ \omega^2 \frac{d}{d\varphi}(\mathbb{V}(\varphi + 1/2) + \mathbb{V}(\varphi)) &= 0,\end{aligned}\tag{3.1.48}$$

und damit

$$\mathbb{R}(\varphi + 1/2) + \mathbb{R}(\varphi) = \text{const}, \quad \mathbb{V}(\varphi + 1/2) + \mathbb{V}(\varphi) = \text{const}.$$

Durch Integration über eine Periode sehen wir, dass beide Konstanten verschwinden müssen. Eliminieren wir jetzt die Differenzen-Terme in (3.1.5), so folgt

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\varphi}\mathbb{R}(\varphi - 1/4) &= 2\mathbb{V}(\varphi), \\ \omega^2 \frac{d}{d\varphi}\mathbb{V}(\varphi) &= \Phi'(r - \mathbb{R}(\varphi - 1/4)) - \Phi'(r + \mathbb{R}(\varphi - 1/4)).\end{aligned}$$

Mit $\tau := 2\varphi/\omega$ und (3.1.46) sowie (3.1.47) ergibt sich schließlich (3.1.45). \square

Das HAMILTON-System (3.1.45) beschreibt die Bewegung eines Teilchens mit Masse 1 im symmetrischen und konvexen *Oszillatorpotential* Φ_{osz} . Beachte, dass sowohl R als auch V periodisch mit Periode $2/\omega$ sind. Jede Lösung von von (3.1.5) mit $k = 1/2$ bzw. von (3.1.45) nennen wir eine *binäre Oszillation*.

3.2 Thermodynamik von Traveling-Waves

3.2.1 Übersicht

In diesem Unterkapitel untersuchen wir, welche Abhängigkeiten es zwischen den in Abschnitt 3.1.1 eingeführten Größen, wie zum Beispiel U , W oder S , gibt. Dazu betrachten wir glatte Familien von Traveling-Waves, die von verschiedenen Parametern \vec{u} abhängen. Alle physikalischen Größen sind damit Funktionen von \vec{u} , die aber durch *konstitutive Gesetze* miteinander verknüpft sind. Im Folgenden wollen wir nun möglichst viele dieser konstitutiven Gesetze ableiten.

Ausgehend von verschiedenen Parametermengen \vec{u} werden wir auch unterschiedliche konstitutive Gesetze finden, die sich jedoch alle in das klassische Schema der Thermodynamik bringen lassen. So werden wir immer ein *thermodynamisches Potential* identifizieren können, das durch eine *Zustandsgleichung* gegeben ist, und für das eine GIBBS-Gleichung formuliert werden kann. Alle anderen konstitutiven Beziehungen folgen dann aus dieser GIBBS-Gleichung durch Differentiation des thermodynamischen Potentials nach

den Variablen. Wir nehmen unsere Ergebnisse in folgender Tabelle vorweg:

unabhängige Variablen	thermodynamische Potentiale	GIBBS-Gleichungen
(r, k, γ)	$W = W(r, k, \gamma)$	$dW = \omega^2 d\gamma - p dr - g dk$
(r, k, ω)	$F = F(r, k, \omega)$	$dF = S d\omega + p dr + g dk$
(r, k, S)	$U = U(r, k, S)$	$dU = \omega dS - p dr - g dk$

Im Folgenden werden wir stets von einer glatten Familie \mathbb{V} von Traveling-Velocity-Waves ausgehen, die auf einer offenen Menge definiert ist und die Werte in $L^2([0, 1])$ annimmt. Um die Abhängigkeit von den Parametern \vec{u} deutlich von der Abhängigkeit von der Phasenvariable φ zu unterscheiden, schreiben wir

$$\mathbb{V} = \mathbb{V}(\vec{u}; \cdot) \in L^2([0, 1]). \quad (3.2.1)$$

Mit $\mathbb{V}(\vec{u}; \varphi)$ bezeichnen wir dagegen den Wert einer Traveling-Velocity-Wave im Argument φ .

Wir erinnern daran, dass die mittlere Geschwindigkeit v nicht explizit in den Traveling-Wave-Gleichungen, vgl. (3.1.5) bzw. (3.1.13), auftritt, und dass bis auf die Gesamtenergie E alle in 3.1.1 definierten physikalischen Größen nicht von v abhängen. Wir wollen daher in diesem Unterkapitel v nicht als Parameter einer Traveling-Wave auffassen.

3.2.2 Die Parameter (r, k, γ)

Sei $\mathbb{V}(r, k, \gamma; \cdot)$ eine glatte Familie von Traveling-Velocity-Waves, die durch $\vec{u} = (r, k, \gamma)$ parametrisiert sind. Wir erinnern daran, dass die Existenz solcher Familien durch Theorem 3.1.3 gesichert ist, wobei wir deren Glattheit postulieren. Wie definieren zunächst eine Funktion W durch

$$W(r, k, \gamma) = \mathcal{W}(r, k, \mathbb{V}(r, k, \gamma; \cdot)), \quad (3.2.2)$$

wobei \mathcal{W} das in Definition 3.1.1 eingeführte, parametrisierte Funktional ist.

Theorem 3.2.1 *Die Funktion $W = W(r, k, \gamma)$ ist monoton wachsend in γ , und es gilt*

$$dW = \omega^2 d\gamma - p dr - g dk, \quad (3.2.3)$$

das heißt

$$\omega^2 = \partial_\gamma W, \quad p = -\partial_r W, \quad g = -\partial_k W. \quad (3.2.4)$$

Beweis: Das Funktional \mathcal{W} ist glatt in r und k sowie GATEAUX-differenzierbar bzgl. der Variablen \mathbb{V} . Da die Familie $\mathbb{V}(r, k, \gamma; \cdot)$ als glatt vorausgesetzt ist, ist W differenzierbar

bzgl. r , k und γ . Differenzieren wir nun W nach γ , so erhalten wir

$$\begin{aligned}\partial_\gamma W &= \int_0^1 \Phi' \left(r + \hat{A}_k \mathbb{V}(\varphi) \right) \cdot \left(\hat{A}_k \partial_\gamma \mathbb{V} \right)(\varphi) d\varphi \\ &= \omega^2 \int_0^1 \mathbb{V}(\varphi) \partial_\gamma \mathbb{V}(\varphi) d\varphi = \omega^2 \partial_\gamma \gamma = \omega^2 > 0.\end{aligned}\quad (3.2.5)$$

Hierbei haben wir die Abhängigkeit von r , k und γ nicht explizit geschrieben. Die Ableitung von W nach r liefert

$$\begin{aligned}\partial_r W &= \int_0^1 \Phi' \left(r + \hat{A}_k \mathbb{V}(\varphi) \right) \left(r + \hat{A}_k \partial_r \mathbb{V}(\varphi) \right) d\varphi \\ &= -p + \omega^2 \int_0^1 \mathbb{V}(\varphi) \partial_r \mathbb{V}(\varphi) d\varphi \\ &= -p + \omega^2 \partial_r \gamma = -p.\end{aligned}\quad (3.2.6)$$

Mittels einer ähnlichen Rechnung erhalten wir $\partial_k W = -g$. \square

Die Aussagen dieses Theorem können wie folgt interpretiert werden: Die innere potentielle Energie W ist thermodynamisches Potential mit Zustandsgleichung (3.2.2), und (3.2.3) ist die entsprechende GIBBS-Gleichung.

3.2.3 Die Parameter (r, k, ω)

In diesem Abschnitt betrachten wir glatte Familien $\mathbb{V}(\vec{u}; \cdot)$ von Traveling-Velocity-Waves, die durch $\vec{u} = (r, k, \omega)$ parametrisiert sind, da wir solche Familien in Abschnitt 4.2 verwenden werden.

Lemma 3.2.2 *Für alle Parameter ist $\mathbb{V}(r, k, \omega; \cdot)$ ein stationärer Punkt des Funktionals*

$$\mathbb{V} \in L^2([0, 1]) \rightarrow \mathcal{F}(r, k, \omega, \mathbb{V}), \quad (3.2.7)$$

wobei

$$\mathcal{F}(r, k, \omega, \mathbb{V}) := \frac{\omega^2}{2} \int_0^1 \mathbb{V}(\varphi)^2 d\varphi - \int_0^1 \Phi \left(r + \hat{A}_k \mathbb{V}(\varphi) \right) d\varphi. \quad (3.2.8)$$

Beweis: Das Funktional \mathcal{F} ist GATEAUX-differenzierbar bzgl. der Variablen \mathbb{V} , wobei die Ableitung durch

$$\partial_{\mathbb{V}} \mathcal{F}(r, k, \omega, \mathbb{V}) = \omega^2 \mathbb{V} - \tilde{A}_k \partial \Phi \left(r + \hat{A}_k \mathbb{V} \right) \quad (3.2.9)$$

gegeben ist, d.h. (3.1.13) ist gerade die EULER-LAGRANGE-Gleichung des Funktionals (3.2.7). \square

Wir setzen nun

$$F(r, k, \omega) := \mathcal{F}(r, k, \omega, \mathbb{V}(r, k, \omega)). \quad (3.2.10)$$

Theorem 3.2.3 *Es gilt*

$$dF = S d\omega + g dk + p dr. \quad (3.2.11)$$

Beweis: Die Gleichung 3.2.11 folgt durch Differentiation der Funktion F nach all ihren Parametern. \square

Sind (r, k, ω) die unabhängigen Variablen, so ist die innere Wirkung F das thermodynamische Potential, wobei (3.2.10) bzw. (3.2.11) die Zustandsgleichung bzw. die GIBBS-Gleichung sind.

3.2.4 Die Parameter (r, k, S)

Manchmal ist es sinnvoll, Familien $\mathbb{V}(\vec{u}; \cdot)$ von Traveling-Velocity-Waves zu betrachten, die durch $\vec{u} = (r, k, S)$ parametrisiert sind. So werden wir in Abschnitt 4.2 zeigen, dass die Modulationsgleichungen für diese Parameter eine besonders einfache Struktur aufweisen. Zuerst suchen wir wieder eine variationstheoretische Charakterisierung solcher Traveling-Velocity-Waves.

Lemma 3.2.4 *Für alle Parameter ist $\mathbb{V}(r, k, S, \cdot)$ ein stationärer Punkt des Funktional*

$$\mathbb{V} \in L^2([0, 1])/\{0\} \rightarrow \mathcal{U}(r, k, S, \mathbb{V}), \quad (3.2.12)$$

wobei

$$\mathcal{U}(r, k, S, \mathbb{V}) := \frac{S^2}{2 \int_0^1 \mathbb{V}(\varphi)^2 d\varphi} + \int_0^1 \Phi\left(r + \tilde{A}_k \mathbb{V}(\varphi)\right) d\varphi. \quad (3.2.13)$$

Beweis: (3.1.13) ist die EULER-LAGRANGE-Gleichung für das Funktional (3.2.12). \square

Wir haben nun auch für die Parameter (r, k, S) das thermodynamische Potential, nämlich U , und die entsprechende Zustandsgleichung

$$U(r, k, S) = \mathcal{U}(r, k, S, \mathbb{V}(r, k, S)) \quad (3.2.14)$$

identifiziert. Die entsprechende GIBBS-Gleichung liest sich wie folgt:

Theorem 3.2.5 *Es gilt*

$$dU = \omega dS - g dk - p dr. \quad (3.2.15)$$

Beweis: Durch Differentiation der Funktion U nach all ihren Parametern. \square

3.2.5 Bemerkungen

Im Rahmen der klassischen Thermodynamik werden Variablenwechsel mit Hilfe von LEGENDRE-Transformationen der thermodynamischen Potentiale beschrieben. Diese Strategie kann auch innerhalb der Thermodynamik von Traveling-Waves angewendet werden, sofern die LEGENDRE-Transformierten (LT) der thermodynamischen Potentiale existieren.

Lemma 3.2.6 *Seien r und k fixiert. Dann gilt:*

1. *Ist $\omega^2 = \omega^2(\gamma)$ invertierbar, so ist F die LT von W bzgl. γ , und W ist die LT von F bzgl. ω^2 .*
2. *Ist $S = S(\omega)$ invertierbar, so ist U die LT von F bzgl. ω , und F ist die LT von U bzgl. S .*

Beweis: Alle Behauptungen lassen sich mit Hilfe elementarer Rechnungen beweisen. □

Insbesondere gilt: Falls wir die Zustandsgleichung für ein thermodynamisches Potential kennen, so können unter den o.g. Invertierbarkeitsannahmen die anderen thermodynamischen Potentiale berechnen. Allerdings können wir nicht die Gültigkeit der Invertierbarkeitsannahmen für allgemeine nichtlineare aber konvexe Wechselwirkungspotentiale Φ beweisen.

Obwohl wir eine Reihe von konstitutiven Gesetzen ableiten konnten, haben wir die Thermodynamik von Traveling-Waves nicht vollständig charakterisiert, denn im Allgemeinen bleiben die Zustandsgleichungen für die thermodynamischen Potentiale unbestimmt. Wir werden deshalb in den Abschnitten 3.2.6 und 3.2.7 wichtige Spezialfälle eingehender betrachten, und außerdem in Unterkapitel 3.3 Wege aufzeigen, wie die Zustandsgleichungen approximativ berechnet werden können. Ein weiteres Problem betrifft die Eindeutigkeit der Zustandsgleichungen bzw. die Eindeutigkeit der parametrisierten Familien von Traveling-Waves: Wir verfügen über kein Resultat, das diese Eindeutigkeit unter generischen Annahmen für konvexe Wechselwirkungspotentiale garantiert.

Abschließend wollen wir zeigen, dass es gewisse Symmetrieeigenschaften bzgl. $k = 1/2$ gibt. Dazu setzen wir $\vec{u} = (r, k, \omega)$ und betrachten für den Moment nur die Abhängigkeit von der Wellenzahl k . Wir sagen, ein Paar (\mathbb{V}, \mathbb{R}) ist *Traveling-Wave-Paar* zur Wellenzahl k , falls \mathbb{V} bzw. \mathbb{R} die Traveling-Wave-Gleichungen (3.1.13) bzw. (3.1.14) erfüllen.

Bemerkung 3.2.7 *(\mathbb{V}, \mathbb{R}) ist Traveling-Wave-Paar für k genau dann, wenn $(-S_{1/2}\mathbb{V}, \mathbb{R})$ Traveling-Wave-Paar für $1 - k$ ist.*

Dabei ist $S_{1/2}$ der Verschiebeoperator aus Lemma 3.1.5. Diese Symmetrieeigenschaften können aus Gleichung (3.1.22) mittels elementarer Transformationen abgeleitet werden.

Wir können daher annehmen, dass die in Abschnitt 3.2.3 betrachteten Familien von Traveling-Waves auch diese Symmetrieeigenschaften besitzen. Unter dieser Annahme kann

leicht gezeigt werden, dass der Entropiefluss g *antisymmetrisch* bzgl. $k = 1/2$ ist, wohingegen alle anderen Größen, also insbesondere U , S , F usw., *symmetrisch* bzgl. $k = 1/2$ sind und daher bei $k = 1/2$ lokale Maxima oder Minima annehmen.

Schließlich bemerken wir, dass die in Bemerkung 3.2.7 formulierten Symmetrieeigenschaften sinngemäß auch dann gelten, wenn wir statt der Frequenz ω die Entropie S oder den Parameter γ fixieren. Insbesondere erwarten wir, dass g immer *antisymmetrisch*, alle anderen Größen aus Abschnitt 3.1.1 jedoch immer *symmetrisch* bzgl. $k = 1/2$ sind.

3.2.6 Thermodynamik der Modelle A , B und C

Im letzten Abschnitt haben wir gezeigt, wie für unterschiedliche Parametermengen \vec{u} die Thermodynamik von Traveling-Waves abgeleitet werden kann. Wir wollen noch einmal zu unseren drei Beispiel-Modellen zurückkehren, um sie im Lichte der Thermodynamik erneut zu betrachten.

Modell A

Da für die harmonische Kette die Dispersionsrelation

$$\omega(k) = \frac{c_0 \sin(\pi k)}{\pi} \quad (3.2.16)$$

die Frequenz ω als Funktion der Wellenzahl k festlegt, können wir nicht $\vec{u} = (r, k, \omega)$ wählen. In Abschnitt 3.1.3 haben wir aber eine Familie von Traveling-Velocity-Waves mit den Parametern $\vec{u} = (r, k, \gamma)$ angegeben. Die entsprechende Zustandsgleichung kann aus (3.1.35) abgelesen werden:

$$W(r, k, \gamma) = \frac{1}{2}c_0^2 r^2 + \omega(k)^2 \gamma. \quad (3.2.17)$$

Wir können aber auch $\vec{u} = (r, k, S)$ wählen. In diesem Fall erhalten wir folgende Zustandsgleichung:

$$U(r, k, S) = \frac{1}{2}c_0^2 r^2 + \omega(k)S. \quad (3.2.18)$$

Die Modelle B und C

In Abschnitt 3.1.3 haben wir $\vec{u} = (r, k, \omega)$ gewählt, so dass F das entsprechende thermodynamische Potential ist. Gemäß (3.1.38) ergibt sich für das Modell B die Zustandsgleichung

$$F(r, k, \omega) = \frac{(r - r_0)^2 \omega^2}{2k(1 - k)}, \quad (3.2.19)$$

wohingegen die Zustandsgleichung für Modell C aus (3.1.44) übernommen werden kann. Es gilt

$$F(r, k, \omega) = \frac{(r - r_0)^2 \omega^2}{2k(1 - k) - \sigma(\omega)}. \quad (3.2.20)$$

Für das Modell B können wir die Frequenz ω relativ einfach durch die Entropie S eliminieren, und erhalten so die Zustandsgleichung

$$U(r, k, S) = \frac{S^2 k(1-k)}{2(r-r_0)^2}. \quad (3.2.21)$$

3.2.7 Thermodynamik binärer Oszillationen

Wie wir im Abschnitt 3.1.4 gesehen haben, kann jede binäre Oszillation vollständig durch ein System gewöhnlicher Differentialgleichung beschrieben werden, vgl. Lemma 3.1.10. Die HAMILTONSche Struktur von (3.1.45) erlaubt es, binäre Oszillationen für festes r durch den Wert der Oszillatorenergie H_{osz} zu parametrisieren. Wie wir sehen werden, gibt H_{osz} gerade den Wert der inneren Energie U an. Daher erhalten wir alle konstitutiven Gesetze für $k = 1/2$ als Funktionen von r und U .

Theorem 3.2.8 *Für binäre Oszillationen gilt:*

1. Die Frequenz ω und die Entropie S sind gegeben durch

$$\frac{1}{\omega} = \int_{-R^*}^{+R^*} \frac{dR}{\sqrt{2(U - \Phi_{\text{osz}}(R))}}, \quad (3.2.22)$$

$$S = \int_{-R^*}^{+R^*} \sqrt{2(U - \Phi_{\text{osz}}(R))} dR, \quad (3.2.23)$$

wobei $R^* > 0$ die positive Lösung von $U = \Phi_{\text{osz}}(R^*)$ bezeichnet.

2. Der Entropiefluss verschwindet, d.h. es gilt $g = 0$.
3. Die GIBBS-Gleichung reduziert sich zu

$$\omega dS = dU + p dr. \quad (3.2.24)$$

Beweis: Wir verwenden die Bezeichnungen aus Lemma 3.1.10. Weil H_{osz} ein Integral der Bewegung für (3.1.45) ist, finden wir

$$\begin{aligned} U &= \int_0^1 \left(\frac{\omega^2}{2} \mathbb{V}(\varphi)^2 + \Phi(r + \mathbb{R}(\varphi)) \right) d\varphi \\ &= \frac{\omega}{2} \int_0^{2/\omega} H_{\text{osz}}(V(\tau), R(\tau)) d\tau = H_{\text{osz}}. \end{aligned} \quad (3.2.25)$$

Ohne Einschränkung können wir annehmen, dass $V(\tau) > 0$ innerhalb der ersten Halperiode $0 \leq \tau \leq \omega^{-1}$ gilt. Wir erhalten

$$R(\tau = 0) = -R^* \quad \text{sowie} \quad R(\tau = 1/\omega) = +R^*. \quad (3.2.26)$$

Weiterhin folgt

$$\frac{2}{\omega} = 2 \int_0^{1/\omega} d\tau = 2 \int_{-R^*}^{+R^*} \frac{dR}{V} = 2 \int_{-R^*}^{+R^*} \frac{dR}{\sqrt{2(U - \Phi_{\text{osz}}(R))}}. \quad (3.2.27)$$

Die Definitionen von S und γ implizieren schließlich

$$\begin{aligned} S &= 2\omega\gamma = \frac{1}{\omega} \int_0^1 \omega^2 \mathbb{V}(\varphi)^2 d\varphi \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{2/\omega} V(\tau)^2 d\tau = \int_0^{\omega} V(\tau)^2 d\tau \\ &= \int_{-R^*}^{+R^*} 2(U - \Phi_{\text{osz}}(R)) \frac{dR}{\sqrt{2(U - \Phi_{\text{osz}}(R))}}, \end{aligned} \quad (3.2.28)$$

und damit ist (3.2.23) bewiesen. Aus (3.1.48) schließen wir $B_k \mathbb{V} = 0$ und damit $g = 0$. Mit $g = 0$ folgt (3.2.24) aus (3.2.15). \square

Hier sehen wir eine Motivation für die Interpretation von S als Entropie: Die rechte Seite in der GIBBS-Gleichung (3.2.24) ist wohlbekannt in der klassischen Gleichgewichts-Thermodynamik, wobei in unserem 1D-Fall die spezifische Länge r die Rolle des spezifischen Volumens übernimmt. Dementsprechend können wir $k = 1/2$ als *Gleichgewicht* interpretieren, da dort das System vollständig durch die spezifische innere Energie U und die spezifische Länge r charakterisiert ist. Phänomenologisch werden nun im Gleichgewicht eine *thermodynamische Entropie* S_{TD} und eine *thermodynamische Temperatur* $T_{\text{TD}} > 0$ dadurch eingeführt, dass man fordert

$$T_{\text{TD}} dS_{\text{TD}} = dU + p dr. \quad (3.2.29)$$

Wie wir sehen, haben S und ω gerade die geforderte Eigenschaft, d.h. zumindest im Gleichgewicht $k = 1/2$ ist S eine *thermodynamische Entropie*, und ω ist die dazugehörige *thermodynamische Temperatur*. Die thermodynamische Entropie ist jedoch nicht eindeutig, sondern mit S_{TD} ist auch jede monoton wachsende Funktion von S_{TD} eine thermodynamische Entropie, zu der es eine thermodynamische Temperatur, d.h. einen positiven integrierenden Faktor in (3.2.29), gibt. Insbesondere ist auch $\log S$ eine thermodynamische Entropie. Im Kontext der binären Oszillationen gilt sogar

$$T d(\log S) = dU + p dr, \quad (3.2.30)$$

d.h. der zu $\log S$ gehörende integrierende Faktor ist gerade die *kinetische Temperatur* T . Das würde eigentlich dafür sprechen, die Größe $\log S$ die Entropie zu nennen. Allerdings werden wir im Kapitel 4 sehen, dass im Nicht-Gleichgewicht, d.h. für $k \neq 1/2$, nur noch für S die konsistente Interpretation als thermodynamische Entropie gesichert ist.

3.3 Approximation von Traveling-Waves

Wir haben in diesem Kapitel bisher zum einen die Existenz von Traveling-Waves bewiesen und zum anderen ihre thermodynamischen Eigenschaften in Form von GIBBS-Gleichungen für verschiedene thermodynamische Potentiale charakterisiert. Abgesehen vom Spezialfall $k = 1/2$ und von den Modellpotentialen A , B und C konnten wir aber weder die Profildfunktionen noch die resultierenden Zustandsgleichungen explizit angeben.

Daher wollen wir parametrisierte Familien von Traveling-Waves und ihre Zustandsgleichungen wenigstens approximativ berechnen können. Dazu gibt es im Prinzip mehrere Möglichkeiten:

Zum einen kann man versuchen, die Traveling-Wave-Gleichungen durch geeignete asymptotische Entwicklungen zu vereinfachen. Bisher sind derartige Entwicklungen allerdings nur für den Fall kleiner Amplituden bzw. Energien gelungen, vgl. [FV99] und [DHM04].

Eine weiterer Zugang wurde von FRIESECKE und MATTHIES verfolgt, denen es in [FM02] gelang, den Hochtemperatur-Limes für das LENNARD-JONES Potential zu charakterisieren. Wir werden darauf später noch zurückkommen.

Drittens sind zumindest für das TODA-Potential im Prinzip explizite Darstellungsformeln von periodischen Traveling-Waves in Form elliptischer Integrale verfügbar, siehe [Whi74].

Wir werden im Folgenden einen vierten, für unsere Zwecke besonders geeigneten, Weg beschreiten, um Traveling-Waves approximativ berechnen zu können. Dazu werden wir drei numerische Schemata ableiten, mit denen Traveling-Waves für beliebige nichtlineare aber konvexe Wechselwirkungspotentiale Φ berechnet werden können. Anschließend werden wir anhand einiger numerischer Simulationen das qualitative Verhalten von Traveling-Waves eingehender untersuchen.

3.3.1 Das γ -Schema

Zuerst leiten wir das γ -Schema ab, welches als eine direkte Approximation des Optimierungsproblems (3.1.2) betrachtet werden kann. Um im Folgenden einige technische Argumente zu vereinfachen, wollen wir wieder annehmen, dass das Wechselwirkungspotential der Annahme (2.1.2) genügt.

Schema 3.3.1 *Seien $k \in (0, 1)$, $\gamma > 0$ und r beliebig gegeben, und sei $\mathbb{V}_0 \in H_\gamma$ ein beliebiger Startwert mit $\hat{A}_k \mathbb{V}_0 \neq 0$. Dann definieren wir zwei Folgen $(n \mapsto \mathbb{V}_n) \subset H_\gamma$ und $(n \mapsto \omega_n) > 0$ induktiv durch den folgenden Induktionsschritt:*

$$\mathbb{V}_{n+1} = f_n \mathbb{Z}_n, \quad \omega_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{f_n}}, \quad (3.3.1)$$

wobei

$$\mathbb{Z}_n = \partial_{\mathbb{V}} \mathcal{W}(r, k, \mathbb{V}_n), \quad f_n = \frac{\sqrt{2\gamma}}{\|\mathbb{Z}_n\|}. \quad (3.3.2)$$

Dieses Schema ist wohldefiniert, solange $\|\mathbb{Z}_n\| > 0$ gilt. Außerdem gelten nach Definition für alle n die Gleichungen

$$\frac{1}{2} \|\mathbb{V}_n\|^2 = \gamma \quad \text{und} \quad \omega_{n+1}^2 \mathbb{V}_{n+1} = \mathbb{Z}_n = \hat{A}_k \partial \Phi(r + \hat{A}_k \mathbb{V}_n). \quad (3.3.3)$$

Wir fassen die Eigenschaften dieses Schemas wie folgt zusammen:

Theorem 3.3.2 *Das Schema 3.3.1 ist wohldefiniert und es gilt:*

1. Die Folge

$$n \mapsto W_n := \mathcal{W}(r, k, \mathbb{V}_n) \quad (3.3.4)$$

ist monoton wachsend mit $W_0 > \Phi(r)$.

2. Die Folge $n \mapsto \omega_n$ ist uniform positiv und beschränkt.

3. Die Folge $n \mapsto (\mathbb{V}_n, \omega_n)$ ist kompakt in $H_\gamma \times \mathbb{R}_+$.

4. Ist (\mathbb{V}, ω) ein Häufungspunkt der Folge $n \mapsto (\mathbb{V}_n, \omega_n)$, so ist \mathbb{V} eine Traveling-Velocity-Wave mit Frequenz ω . Außerdem ist \mathbb{V} ein Element des Randes von H_γ .

Beweis:

1. Im Folgenden schreiben wir wieder $\mathcal{W}(\mathbb{V})$ an Stelle von $\mathcal{W}(r, k, \mathbb{V})$. Lemma 3.1.8 liefert

$$\begin{aligned} W_{n+1} - W_n &= \frac{m}{2} \|\hat{A}_k \mathbb{V}_{n+1} - \hat{A}_k \mathbb{V}_n\|^2 + \langle \partial_{\mathbb{V}} \mathcal{W}(\mathbb{V}_n), \mathbb{V}_{n+1} - \mathbb{V}_n \rangle \\ &= \frac{m}{2} \|\hat{A}_k \mathbb{V}_{n+1} - \hat{A}_k \mathbb{V}_n\|^2 + \omega_{n+1}^2 \langle \mathbb{V}_{n+1}, \mathbb{V}_{n+1} - \mathbb{V}_n \rangle \\ &\geq \frac{m}{2} \|\hat{A}_k \mathbb{V}_{n+1} - \hat{A}_k \mathbb{V}_n\|^2 + \\ &\quad \omega_{n+1}^2 (\|\mathbb{V}_{n+1}\|^2 - \|\mathbb{V}_{n+1}\| \|\mathbb{V}_n\|) \\ &\geq \frac{m}{2} \|\hat{A}_k \mathbb{V}_{n+1} - \hat{A}_k \mathbb{V}_n\|^2 + \omega_{n+1}^2 (2\gamma - 2\gamma) \\ &\geq \frac{m}{2} \|\hat{A}_k \mathbb{V}_{n+1} - \hat{A}_k \mathbb{V}_n\|^2 \geq 0. \end{aligned} \quad (3.3.5)$$

Diese Abschätzung impliziert die Monotonie der Folge $n \mapsto W_n$. Auf Grund von $\hat{A}_k \mathbb{V}_0 \neq 0$ und wegen (3.1.27) gilt $W_0 > \mathcal{W}(0) = \Phi(r)$.

2. Angenommen, es existiert ein n , so dass gilt $\mathbb{Z}_n = 0$. Nach (3.1.28) gilt dann

$$0 \geq W_n - \mathcal{W}(0) + \frac{m}{2} \|\hat{A}_k \mathbb{V}_n\|^2 \geq 0. \quad (3.3.6)$$

Dies ist aber ein Widerspruch zu $W_n \geq W_0 > \mathcal{W}(0)$. Damit ist Schema 3.3.1 wohldefiniert.

3. Da $\mathbb{V}_n \in H_\gamma$ und weil $\partial_{\mathbb{V}} \mathcal{W}$ ein beschränkter Operator ist, ist die Folge $n \mapsto \mathbb{Z}_n$ beschränkt. Wir schließen $\omega_{n+1}^4 2\gamma = \|\mathbb{Z}_n\|^2 < \infty$ und haben damit die Beschränktheit der Folge $n \mapsto \omega_n$ gezeigt.

4. Die Folge $n \mapsto W_n$ ist konvergent, da sie monoton wachsend und nach Theorem 3.1.3 auch beschränkt ist. Aus (3.3.5) folgt daher

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (\hat{A}_k \mathbb{V}_{n+1} - \hat{A}_k \mathbb{V}_n) = 0. \quad (3.3.7)$$

Die Stetigkeit von $\partial\Phi$ und \hat{A}_k impliziert

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (\mathbb{Z}_{n+1} - \mathbb{Z}_n) = 0. \quad (3.3.8)$$

Mit (3.3.3) gilt auch

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (\omega_{n+1}^2 \mathbb{V}_{n+1} - \omega_n^2 \mathbb{V}_n) = 0. \quad (3.3.9)$$

5. Auf Grund von (3.3.3) und (3.3.9) gilt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (\omega_n^2 \mathbb{V}_n - \mathbb{Z}_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} (\omega_n^2 \mathbb{V}_n - \omega_{n+1}^2 \mathbb{V}_{n+1}) = 0. \quad (3.3.10)$$

Außerdem gilt nach (3.1.28), dass

$$\langle \mathbb{Z}_n, \mathbb{V}_n \rangle \geq \frac{m}{2} \|\hat{A}_k \mathbb{V}_n\|^2. \quad (3.3.11)$$

Sei nun $j \mapsto \omega_{n_j}$ eine Teilfolge der Frequenzen, die gegen Null konvergiert. Aus (3.3.10) folgt

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \langle \mathbb{Z}_{n_j}, \mathbb{V}_{n_j} \rangle = \lim_{j \rightarrow \infty} \omega_{n_j}^2 \|\mathbb{V}_{n_j}\|^2 = 0. \quad (3.3.12)$$

Mit (3.3.11) gilt dann auch

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \hat{A}_k \mathbb{V}_{n_j} = 0 \quad \text{und} \quad \lim_{j \rightarrow \infty} W_{n_j} = \mathcal{W}(r, k, \gamma, 0) = \Phi(r).$$

Das ist aber ein Widerspruch zur Monotonie von $n \mapsto W_n$, denn es gilt $W_n \geq W_0 > \Phi(r)$. Insgesamt haben wir damit die gleichmäßige Positivität von $n \mapsto \omega_n$ gezeigt.

6. Auf Grund der schwachen Kompaktheit von H_γ (Satz von EBERLEIN-ŠMULJAN) existieren Teilfolgen $j \mapsto n_j$, so dass für $j \rightarrow \infty$ die Folge $j \mapsto \mathbb{V}_{n_j}$ schwach gegen einen Grenzwert $\mathbb{V}_\infty \in H_\gamma$ konvergiert. Wir können annehmen, dass auch die Folge $j \mapsto \omega_{n_j}$ gegen ein $\omega_\infty > 0$ konvergiert. Da der Operator $\partial_{\mathbb{V}}\mathcal{W}$ kompakt ist, gilt im Sinne der starken Konvergenz

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \mathbb{Z}_{n_j} = \partial_{\mathbb{V}}\mathcal{W}(\mathbb{V}_\infty) =: \mathbb{Z}_\infty. \quad (3.3.13)$$

Außerdem gilt

$$\mathbb{V}_{n_j} = \frac{\mathbb{Z}_{n_j}}{\omega_{n_j}^2} + \frac{\omega_{n_j}^2 \mathbb{V}_{n_j} - \mathbb{Z}_{n_j}}{\omega_{n_j}^2}. \quad (3.3.14)$$

Die Konvergenzaussagen (3.3.10) und (3.3.13) liefern nun die starke Konvergenz

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \mathbb{V}_{n_j} = \frac{\mathbb{Z}_\infty}{\omega_\infty^2} \quad (3.3.15)$$

sowie die Grenzwert-Gleichung

$$\omega_\infty^2 \mathbb{V}_\infty = \partial_{\mathbb{V}} \mathcal{W}(\mathbb{V}_\infty). \quad (3.3.16)$$

Insbesondere gilt $\|\mathbb{V}_\infty\|^2 = 2\gamma$. Wir haben nun sowohl die (starke) Kompaktheit der Folge $n \mapsto (\mathbb{V}_n, \omega_n)$ als auch die behaupteten Eigenschaften der Häufungspunkte bewiesen.

□

Wir schließen mit folgenden Bemerkungen.

1. Es bleibt offen, ob das Schema 3.3.1 konvergiert, d.h. ob es genau einen oder vielleicht mehrere Häufungspunkte gibt. Numerische Simulationen legen die Vermutung nahe, dass das Schema für alle Startwerte konvergiert.
2. Sind $(\mathbb{V}_\infty^{(1)}, \omega_\infty^{(1)})$ und $(\mathbb{V}_\infty^{(2)}, \omega_\infty^{(2)})$ zwei Häufungspunkte der Folge $n \mapsto (\mathbb{V}_n, \omega_n)$, so gilt zumindest

$$\mathcal{W}(r, k, \mathbb{V}_\infty^{(1)}) = \mathcal{W}(r, k, \mathbb{V}_\infty^{(2)}). \quad (3.3.17)$$

3. Die Menge der Häufungspunkte der Folge $n \mapsto W_n$ kann vom Startwert abhängen.
4. Das γ -Schema 3.3.1 wurde bereits von FILIP und VENAKIDES in [FV99] beschrieben. Allerdings haben die beiden Autoren kein Kompaktheitsresultat bewiesen, sondern nur die numerische Konvergenz beobachtet.

3.3.2 Das S -Schema und das T -Schema

Mit Hilfe des Schemas 3.3.1 können sowohl Traveling-Wave-Profile als auch die Zustandsgleichung $W = W(r, k, \gamma)$ numerisch berechnet werden. Da aber der Parameter γ keine physikalische Bedeutung besitzt, sind wir an numerischen Schemata interessiert, die die Vorgabe einer anderen Größe erlauben. Es werden besonders zwei Fälle wichtig sein: Erstens werden wir in Kapitel 4 sehen, dass die Zustandsgleichung $U = U(r, k, S)$ im Rahmen der Modulationstheorie eine besondere Rolle spielt. Daher sind wir an der approximativen Berechnung dieser Funktion interessiert. Zweitens wird es sich im Kapitel 5 als hilfreich erweisen, wenn auch die Temperatur T einer Traveling-Wave vorgegeben werden kann.

In diesem Abschnitt modifizieren wir das γ -Schema 3.3.1 so, dass statt dem Parameter γ entweder die Entropie S oder die Temperatur T vorgegeben werden kann. Wir formulieren nun das resultierende S - bzw. T -Schema.

Schema 3.3.3 *Sei (r, k, S) bzw. (r, k, T) gegeben und sei $\mathbb{V}_0 \in L^2([0, 1])$ ein beliebiger Startwert mit $\hat{A}_k \mathbb{V}_0 \neq 0$. Sei außerdem $\lambda \in (0, 1)$ ein beliebig gewählter Parameter. Dann definieren wir zwei Folgen $(n \mapsto \mathbb{V}_n) \subset L^2([0, 1])$ und $(n \mapsto \omega_n) > 0$ induktiv durch den folgenden Induktionsschritt:*

$$\mathbb{V}_{n+1} = \lambda f_n \mathbb{Z}_n + (1 - \lambda) \mathbb{V}_n, \quad \omega_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{f_n}}, \quad (3.3.18)$$

wobei $Z_n = \hat{A}_k \partial \Phi \left(r + \hat{A}_k \mathbb{V}_n \right)$ und

$$f_n = \left(\frac{S}{\|Z_n\|^2} \right)^{\frac{2}{3}} \quad \text{bzw.} \quad f_n = \frac{T}{\|Z_n\|^2} \quad (3.3.19)$$

im Falle des S - bzw. des T -Schemas.

Beachte die Ähnlichkeit der Schemata 3.3.1 und 3.3.3: Neben der Einführung des „Verzögerungsparameters“ λ haben wir in jedem Schritt nur den Wert des Faktors f_n geändert. Im Falle $\lambda = 1$ gilt

$$S = 2 \omega_{n+1} \gamma_{n+1} \quad \text{bzw.} \quad T = 2 \omega_{n+1}^2 \gamma_{n+1}, \quad (3.3.20)$$

wobei $\gamma_{n+1} := \frac{1}{2} \|\mathbb{V}_{n+1}\|^2$.

Lemma 3.3.4 *Jeder Fixpunkt \mathbb{V}_∞ des Schemas (3.3.1) ist eine Traveling-Velocity-Wave mit Entropie S bzw. mit Temperatur T .*

Beweis: Die Behauptung folgt mit dem Ansatz $\mathbb{V}_{n+1} = \mathbb{V}_n = \mathbb{V}_\infty$. □

Leider verfügen wir für das S - bzw. T -Schema über kein zu Theorem 3.3.2 äquivalentes Resultat. Das liegt daran, dass wir nicht die Beschränktheit der konstruierten Folgen zeigen können. Numerische Simulationen lassen aber vermuten, dass auch Schema (3.3.3) für alle Startwerte konvergiert, sofern λ hinreichend klein ist.

3.3.3 Weitere Bemerkungen

Wir haben in Abschnitt 3.2.5 dargestellt, dass wir verschiedene Symmetrien bzgl. $k = 1/2$ erwarten können. Die approximativen Schemata zeigen uns, dass wir auch gewisse Symmetrien in den Profil-Funktionen voraussetzen können. Dazu betrachten wir in $L^2([0, 1])$ den Unterraum H_{symm} aller Funktionen, die symmetrisch bzgl. $\varphi = 1/2$ sind, d.h.

$$H_{\text{symm}} := \left\{ \mathbb{V} \in L^2([0, 1]) : \mathbb{V}\left(\frac{1}{2} - \varphi\right) = \mathbb{V}\left(\frac{1}{2} + \varphi\right) \text{ f.f.a. } 0 \leq \varphi \leq \frac{1}{2} \right\}.$$

Es ist leicht einzusehen, dass die Operatoren $\partial \Phi$ und \hat{A}_k diesen Raum in sich abbilden. Folglich liefern die Schemata 3.3.1 und 3.3.3 Funktionenfolgen in H_{symm} , sofern der Startwert \mathbb{V}_0 in H_{symm} liegt. Da H_{symm} abgeschlossen ist, liegt auch jeder Häufungspunkt in H_{symm} .

Da die Schemata 3.3.1 und 3.3.3 nicht diskret in der Phase φ sind, wollen wir abschließend kurz skizzieren, wie sie implementiert werden können. Dazu unterteilen wir das Einheitsintervall in $2M$ äquidistante Teile der Länge $\delta = 1/(2M)$, und approximieren jede 1-periodische Funktion \mathbb{V} durch einen $2M$ -dimensionalen Vektor $V = (V_i)_{i=1 \dots 2M}$ mit Norm

$$\|V\|_\delta^2 = \delta \sum_{j=1}^{2M} V_j^2. \quad (3.3.21)$$

Die Operatoren $\partial\Phi$ und \hat{A}_k können nun für $k = 2K/2M$ durch $\partial\Phi^{(\delta)}$ und $\hat{A}_k^{(\delta)}$ wie folgt approximiert werden:

$$\left(\partial\Phi^{(\delta)}(r+V)\right)_i = \Phi'(r+V_i), \quad (3.3.22)$$

$$\left(\hat{A}_k^{(\delta)}V\right)_i = \delta \sum_{j=i-K}^{i+K-1} \frac{V_j + V_{j+1}}{2} - k\delta \sum_{j=1}^{2M} V_j. \quad (3.3.23)$$

Nun können die diskreten Versionen der Schemata 3.3.1 und 3.3.3 direkt abgeleitet werden. Wir erwähnen, dass sowohl Theorem 3.3.2 als auch Lemma 3.3.4 sinngemäß für die diskreten Schemata gilt.

3.3.4 Numerische Strukturanalyse für Traveling-Waves

In diesem Abschnitt wollen wir mit Hilfe des γ -Schemas 3.3.1 die qualitativen Eigenschaften von Traveling-Waves eingehender untersuchen. Dabei nutzen wir die im letzten Abschnitt skizzierte Diskretisierung, wobei wir konkret $M = 600$ gesetzt haben. Außerdem wollen wir uns auf das TODA-Potential beschränken, da es zum einen prototypisch für eine große Klasse von nichtlinearen konvexen Wechselwirkungspotentialen steht, zum anderen aber der Einfluss des Parameters r besonders einfach ist (siehe dazu auch den nächsten Abschnitt).

In Abbildung 3.1 sehen wir für $r = 1$, aber für verschiedene Wert von γ und k die numerisch

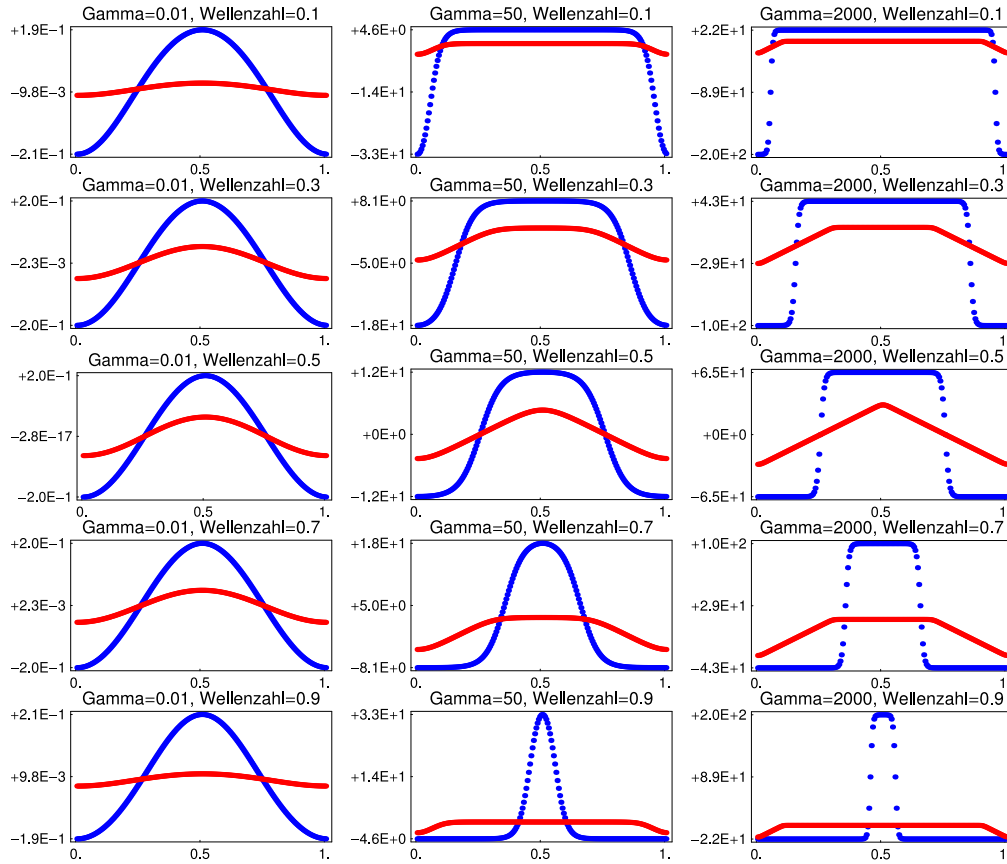


Abb. 3.1: Die Profilfunktionen \mathbb{V} (Blau) und \mathbb{R} (Rot) als Funktionen von φ für $r = 1$ und für verschiedene Werte von γ und k . Φ ist hier das TODA-Potential. \diamond

berechneten Traveling-Wave-Profil \mathbb{V} und \mathbb{R} als Funktionen über φ . Für kleine γ , konkret $\gamma = 0.01$, sind wir praktisch im harmonischen Fall, d.h. die Profilfunktionen sind Vielfache von $\sin(2\pi\varphi)$, wobei die Traveling-Velocity-Wave \mathbb{V} für $\gamma \rightarrow 0$ nicht von k abhängt. Dementsprechend gilt für kleine γ die harmonische Dispersionsrelation, vgl. Abbildung 3.2.

Für größere γ , hier $\gamma = 50$, sehen wir eine deutliche k -Abhängigkeit von \mathbb{V} und \mathbb{R} , wobei diese k -Abhängigkeit der Wellenprofile mit zunehmenden γ immer stärker wird. Für sehr große γ kann die Traveling-Velocity-Wave \mathbb{V} annähernd durch stückweise konstante Funktionen beschrieben werden, wobei die Sprünge in den Abständen k bzw. $1 - k$ erfolgen. Dies bedeutet, dass wir für $\gamma \rightarrow \infty$ erwarten können, dass die Eigenschaften von Traveling-Waves durch das vereinfachte Modell B beschrieben werden, vgl. Abschnitt 3.1.3. FRIESECKE

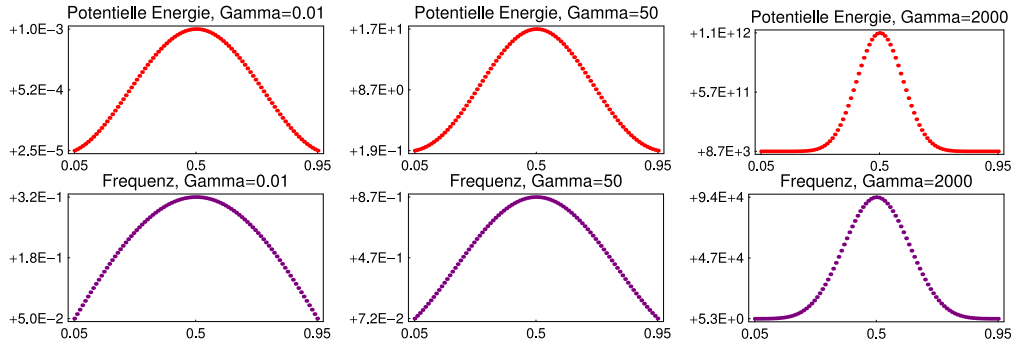


Abb. 3.2: Potentielle Energie W und Frequenz ω als Funktionen von k für verschiedene Werte von γ . \diamond

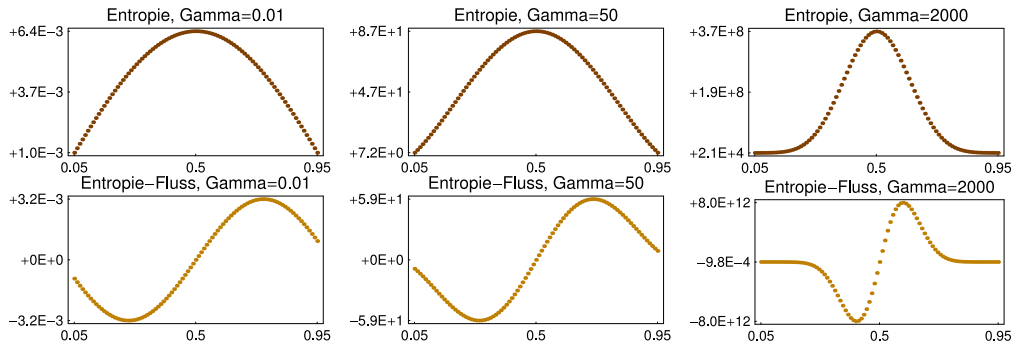


Abb. 3.3: Entropie S und Entropiefluss g als Funktionen von k für verschiedene γ . \diamond

und MATTHIES haben in [FM02] ein analoges Limes-Verhalten für das LENNARD-JONES-Potential rigoros hergeleitet.

In den Abbildungen 3.2 und 3.3 haben wir für $r = 1$ und für verschiedene Werte von γ die thermodynamischen Größen W , ω , S und g als Funktionen über der Wellenzahl k aufgetragen. Insbesondere beobachten wir die in Abschnitt 3.2.5 diskutierte Symmetrie bzw. Antisymmetrie bzgl. $k = 1/2$.

In Abbildung 3.4 sind schließlich die Verteilungsfunktionen im mikroskopischen Phasenraum dargestellt, die den Profildfunktionen aus Abbildung 3.1 entsprechen: Wir haben in Abbildung 3.4 die Trajektorien

$$\varphi \mapsto (r + \mathbb{R}(\varphi + k/2), \omega \mathbb{V}(\varphi)) \quad (3.3.24)$$

dadurch approximiert, dass wir für 200 äquidistant verteilte Werte der Phase $\varphi \in [0, 1]$ die entsprechenden Bildpunkte im mikroskopischen Phasenraum gezeichnet haben. Wir erinnern daran, dass die Trajektorien (3.3.24) gerade die atomaren Oszillationen im mikroskopischen Phasenraum beschreiben, die von einer Traveling-Wave-Lösung der atomaren Kette erzeugt werden. Beachte, dass der Wert der Verteilungsfunktion ungefähr umgekehrt proportional ist zum Abstand benachbarter Punkte.

Wie ein erster, zunächst nur qualitativer, Vergleich mit den numerischen Ergebnissen aus Abschnitt 2.2.2 zeigt, sind Traveling-Waves ein sehr guter Kandidat, um die Verteilungsfunktionen der atomaren Kette mit Temperatur zu erklären. Wir werden später im

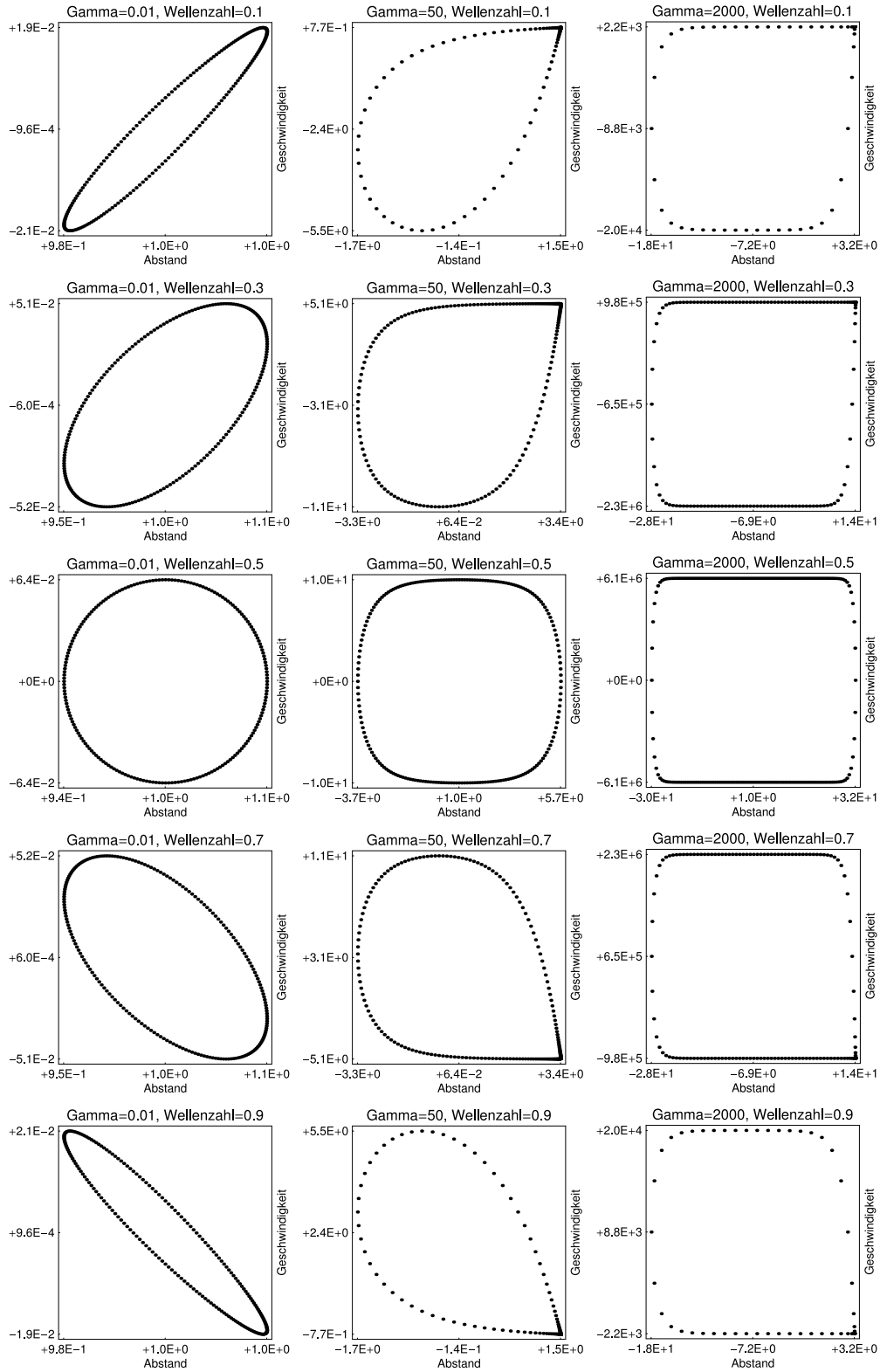


Abb. 3.4: Die Traveling-Waves aus Abbildung 3.1 im mikroskopischen Phasenraum. Die Kurven entsprechen $\varphi \mapsto (\mathbb{R}(\varphi + k/2), \omega \mathbb{V}(\varphi))$. \diamond

Kapitel 5 in der Lage sein, diese Vergleiche auch quantitativ durchzuführen.

3.3.5 Numerische Zustandsgleichung des TODA-Potentials

In diesem Abschnitt wollen wir mit Hilfe des S -Schemas 3.3.3 die Zustandsgleichung $U = U(r, k, S)$ für das TODA-Potential berechnen.

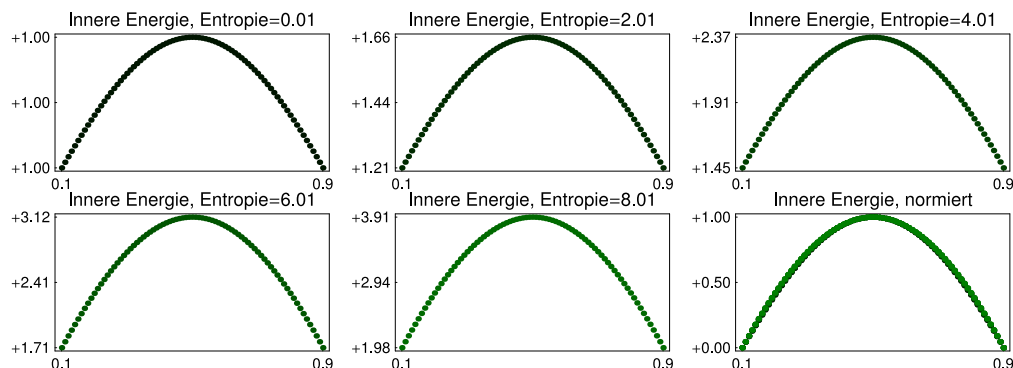


Abb. 3.5: Die innere Energie U für das TODA-Potential mit $r = 1$ als Funktion von der Wellenzahl k für fünf verschiedene Werte von S . Die normierten Kurven sind alle zusammen im sechsten Bild dargestellt. \diamond

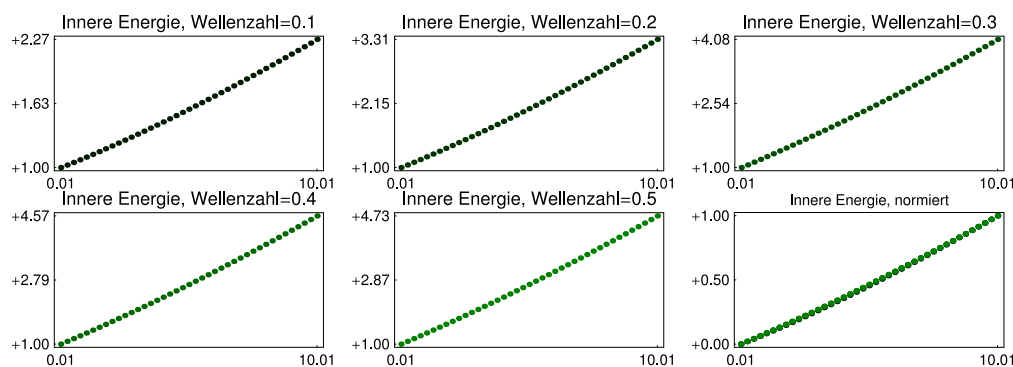


Abb. 3.6: Die innere Energie U für das TODA-Potential mit $r = 1$ als Funktion von S für fünf verschiedene Wellenzahlen k . Das letzte Bild zeigt wieder alle normierten Kurven zusammen. \diamond

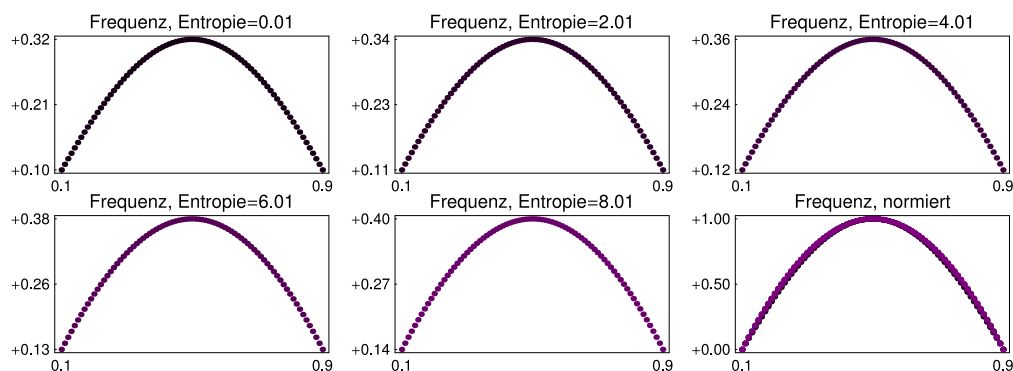


Abb. 3.7: Die Frequenz ω als Funktion von k für fünf verschiedene Werte von S . \diamond

Wir beginnen damit, den Einfluss der spezifischen Länge r explizit anzugeben. Für fixiertes k kann mit Hilfe der Traveling-Wave-Gleichungen (3.1.5) und mit Hilfe der Definition des

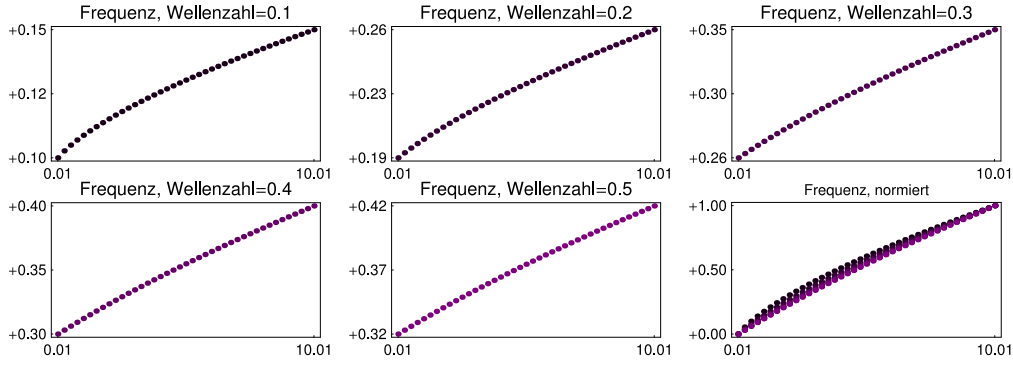


Abb. 3.8: Die Frequenz ω als Funktion von S für fünf verschiedene Wellenzahlen k . \diamond

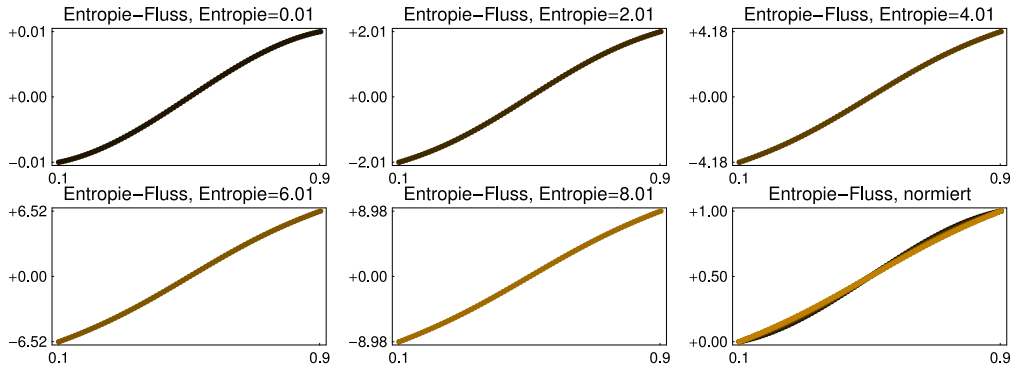


Abb. 3.9: Die Entropiefluss g als Funktion von k für verschiedene Werte von S . \diamond

TODA-Potentials (2.1.7) leicht gezeigt werden, dass, falls \mathbb{V} eine Traveling-Velocity-Wave für $r = 1$ mit Frequenz $\omega(1)$ und Entropie $S(1)$ ist, \mathbb{V} auch eine Traveling-Velocity-Wave für $r \neq 1$ mit Frequenz $\omega(r)$ und Entropie $S(r)$ ist. Dabei gilt

$$\omega(r) = \exp\left(\frac{1-r}{2}\right) \omega(1), \quad S(r) = \exp\left(\frac{1-r}{2}\right) S(1). \quad (3.3.25)$$

Wir wollen daher das S -Schema nur für $r = 1$ verwenden und die resultierende Familie $\mathbb{V}(1, k, S; \cdot)$ wie folgt fortsetzen:

$$\mathbb{V}(r, k, S; \cdot) = \mathbb{V}(1, k, \exp((r-1)/2)S; \cdot). \quad (3.3.26)$$

Schließlich kann aus (3.3.26) die r -Abhängigkeit der inneren Energie U abgeleitet werden. Es ergibt sich

$$U(r, k, S) = \exp(1-r) U\left(1, k, \exp\left(\frac{r-1}{2}\right)S\right) + r - 1. \quad (3.3.27)$$

Die Abhängigkeiten von S und k haben wir im zweiten Schritt mit Hilfe des S -Schemas für $r = 1$ numerisch berechnet, wobei wir für die Diskretisierung wieder $M = 600$ und außerdem $\lambda = 0.5$ gesetzt haben. Die resultierenden Werte für U haben wir in Abbildung 3.5 für fünf verschiedene Werte von S über der Wellenzahl k aufgetragen. Anschließend haben wir die Datensätze für die einzelnen Werte von S so normalisiert, dass ihr Minimum bei 0 und ihr

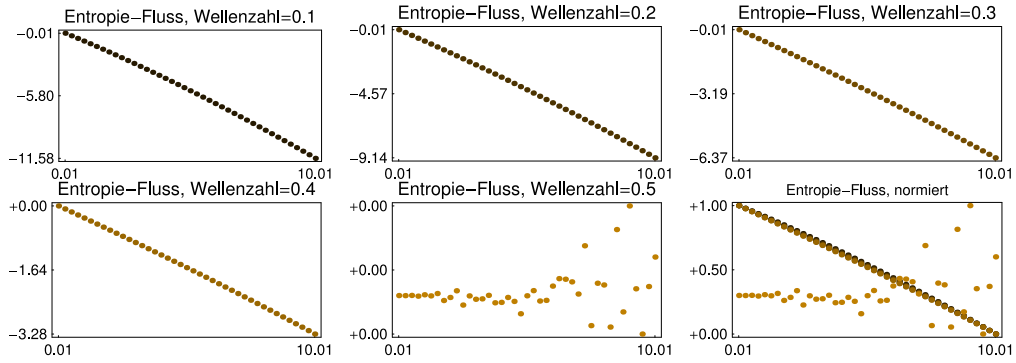


Abb. 3.10: Die Entropiefluss g als Funktion von S für verschiedene Wellenzahlen k . Beachte, dass für $k = 1/2$ alle Werte von g nur numerische Abweichungen von Null darstellen. \diamond

Maximum bei 1 ist. Dazu haben wir das Minimum subtrahiert und danach das Ergebnis mit einem geeigneten Faktor multipliziert. Schließlich haben wir alle normalisierten Datensätze im letzten Bild von Abbildung 3.5 übereinander gelegt.

In Abbildung 3.6 haben wir dagegen für verschiedene Werte von k die innere Energie U als Funktion von S aufgetragen, um dann auch hier die Datensätze analog zu oben zu normalisieren.

In beiden Abbildungen beobachten wir eine Koinzidenz der normierten Datensätze, so dass wir für $S \leq 8$ in etwa die folgende Zustandsgleichung erwarten können:

$$U(1, k, S) = a(k)\tilde{U}(S). \quad (3.3.28)$$

In Übereinstimmung mit den numerischen Ergebnissen – und um im Limes $S \rightarrow 0$ Konsistenz mit dem harmonischen Fall zu erhalten – setzen wir dabei $a(k) = \sin(k\pi)/\pi$. Um unseren Ansatz zu testen, vergleichen wir die numerischen Resultate für ω und g und mit den Voraussagen, die wir aus (3.3.28) mit Hilfe der GIBBS-Gleichung (3.2.11) gewinnen. Gemäß (3.3.28) sollten sich ω bzw. g wie folgt verhalten:

$$\omega(1, k, S) = a(k)\tilde{U}'(S) \quad \text{bzw.} \quad g(1, k, S) = -a'(k)\tilde{U}(S). \quad (3.3.29)$$

Betrachten wir nun die numerischen Ergebnisse für ω bzw. g in den Abbildungen 3.7 und 3.8 bzw. 3.9 und 3.10, so sehen wir, dass unser Ansatz (3.3.28), zumindest für Wellenzahlen k , die nicht zu weit von $1/2$ entfernt liegen (beispielsweise $k \in [1/4, 3/4]$), eine sehr gute Approximation der Zustandsgleichung liefert.

4. Die Modulationstheorie der atomaren Kette

In diesem Kapitel verwenden wir parametrisierte Familien von Traveling-Waves, um mit Hilfe der so genannten Modulationstheorie einen Mikro-Makro-Übergang für die atomare Kette mit Temperatur durchzuführen. Dazu führen wir zunächst in 4.1 den Begriff einer modulierten Traveling-Wave ein, um dann in Abschnitt 4.2 die makroskopischen Modulationsgleichungen formal abzuleiten. Im Unterkapitel 4.3 diskutieren wir dann das Rechtfertigungsproblem für die Modulationstheorie.

4.1 Modulierte Traveling-Waves

Eine *modulierte Traveling-Wave* ist eine approximative Lösung der NEWTONschen Gleichungen (2.1.3), die in jedem Punkt der makroskopischen Raum-Zeit mikroskopisch durch eine Traveling-Wave beschrieben werden kann. Wir werden nun diese verbale Beschreibung genauer formulieren.

Wir betrachten die atomare Kette mit endlicher Teilchenzahl $N < \infty$ und periodischen Randbedingungen und beginnen mit folgendem Ansatz für die atomaren Positionen:

$$x_\alpha(t) = \frac{1}{\varepsilon} X(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) + \tilde{X}\left(\varepsilon t, \varepsilon \alpha; \frac{1}{\varepsilon} \Theta(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right) + \mathcal{O}(\varepsilon), \quad (4.1.1)$$

wobei $\varepsilon = 1/N$ gilt. $X = X(\bar{t}, \bar{\alpha})$ und $\Theta = \Theta(\bar{t}, \bar{\alpha})$ sind hier zwei makroskopische Funktionen, die wir als den makroskopischen Anteil der atomaren Positionen bzw. als die makroskopische Phasenvariable betrachten wollen. Wir setzen dabei voraus, dass beide Funktionen hinreichend glatt sind, und dass die Ableitungen nach $\bar{\alpha}$ beide 1-periodisch sind.

Für jeden makroskopischen Punkt $(\bar{t}, \bar{\alpha})$ beschreibt die Funktion $\tilde{X} = \tilde{X}(\bar{t}, \bar{\alpha}; \varphi)$ die mikroskopischen Oszillationen in den atomaren Abständen und Geschwindigkeiten, denn ausgehend vom Ansatz (4.1.1) finden wir für die atomaren Abstände

$$\begin{aligned} r_\alpha(t) = & \tilde{X}\left(\varepsilon t, \varepsilon \alpha; \frac{1}{\varepsilon} \Theta(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) + \tilde{k}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right) - \\ & \tilde{X}\left(\varepsilon t, \varepsilon \alpha; \frac{1}{\varepsilon} \Theta(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right) + \\ & \tilde{r}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) + \mathcal{O}(\varepsilon), \end{aligned} \quad (4.1.2)$$

und für die atomaren Geschwindigkeiten

$$v_\alpha(t) = \tilde{\omega}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) \frac{d}{d\varphi} \tilde{\mathbb{X}}\left(\varepsilon t, \varepsilon \alpha; \frac{1}{\varepsilon} \Theta(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right) + \tilde{v}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) + \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (4.1.3)$$

Dabei haben wir folgende Abkürzungen verwendet:

$$\tilde{v}(\bar{t}, \bar{\alpha}) = \frac{\partial X}{\partial \bar{t}}(\bar{t}, \bar{\alpha}), \quad \tilde{r}(\bar{t}, \bar{\alpha}) = \frac{\partial X}{\partial \bar{\alpha}}(\bar{t}, \bar{\alpha}), \quad (4.1.4)$$

$$\tilde{\omega}(\bar{t}, \bar{\alpha}) = \frac{\partial \Theta}{\partial \bar{t}}(\bar{t}, \bar{\alpha}), \quad \tilde{k}(\bar{t}, \bar{\alpha}) = \frac{\partial \Theta}{\partial \bar{\alpha}}(\bar{t}, \bar{\alpha}). \quad (4.1.5)$$

Es kann nun leicht durch Einsetzen gezeigt werden, dass die NEWTONschen Bewegungsgleichungen (2.1.3) die folgende Bedingung an die φ -Abhängigkeit der Funktion $\tilde{\mathbb{X}}$ implizieren:

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}^2(\bar{t}, \bar{\alpha}) \frac{d^2}{d\varphi^2} \tilde{\mathbb{X}}(\bar{t}, \bar{\alpha}; \cdot) &= \Phi' \left(\tilde{\mathbb{X}}(\bar{t}, \bar{\alpha}; \cdot + \tilde{k}(\bar{t}, \bar{\alpha})) - \tilde{\mathbb{X}}(\bar{t}, \bar{\alpha}; \cdot) \right) - \\ &\quad \Phi' \left(\tilde{\mathbb{X}}(\bar{t}, \bar{\alpha}; \cdot) - \tilde{\mathbb{X}}(\bar{t}, \bar{\alpha}; \cdot - \tilde{k}(\bar{t}, \bar{\alpha})) \right) + \\ &\quad \mathcal{O}(\varepsilon), \end{aligned} \quad (4.1.6)$$

wobei „ \cdot “ zunächst nur den Term $\frac{1}{\varepsilon} \Theta(\bar{t}, \bar{\alpha})$ ersetzt. Es liegt aber nahe, die Gleichung (4.1.6) im Sinne von Funktionen zu interpretieren, dass heißt, „ \cdot “ durch die freie Phasenvariable φ zu ersetzen. Die Gleichung (4.1.6) besagt dann, dass für jeden makroskopischen Punkt $(\bar{t}, \bar{\alpha})$ die Funktion $\tilde{\mathbb{X}}(\bar{t}, \bar{\alpha}; \cdot)$ eine Traveling-Wave ist, wobei $\tilde{r}(\bar{t}, \bar{\alpha})$, $\tilde{v}(\bar{t}, \bar{\alpha})$, $\tilde{k}(\bar{t}, \bar{\alpha})$ bzw. $\tilde{\omega}(\bar{t}, \bar{\alpha})$ der mittlere Abstand, die mittlere Geschwindigkeit, die Wellenzahl bzw. die Frequenz sind. Mit anderen Worten:

$$\tilde{\mathbb{X}}(\bar{t}, \bar{\alpha}; \varphi) = \mathbb{X}(\tilde{r}(\bar{t}, \bar{\alpha}), \tilde{v}(\bar{t}, \bar{\alpha}), \tilde{k}(\bar{t}, \bar{\alpha}), \tilde{\omega}(\bar{t}, \bar{\alpha}); \varphi), \quad (4.1.7)$$

wobei $\mathbb{X}(r, v, k, \omega; \cdot)$ eine parametrisierte Familie von Traveling-Waves wie im Abschnitt 3.1 ist. Beachte, dass wir von jetzt an die mittlere Geschwindigkeit v explizit als Parameter einer Traveling-Wave angeben. Außerdem wollen wir wieder nur periodische Traveling-Waves mit Periode 1 betrachten.

Die makroskopischen Funktionen \tilde{r} , \tilde{v} , \tilde{k} und $\tilde{\omega}$ nennen wir die *modulierten Parameter*. Um sicherzustellen, dass der Ansatz (4.1.1) auch für makroskopische Zeiten approximative Lösungen der NEWTONschen Bewegungsgleichungen liefert, können die modulierten Parameter nicht beliebig gewählt werden. Daher werden wir im nächsten Unterkapitel 4.2.1 Restriktionen an die makroskopische Evolution der modulierten Parameter in Form partieller Differentialgleichungen ableiten. Zunächst aber wollen wir den Ansatz (4.1.7) noch etwas allgemeiner fassen.

Im Kapitel 3 hatten wir gesehen, dass wir nicht immer davon ausgehen können, dass die Frequenz ω als freier Parameter für eine Traveling-Wave gewählt werden kann, siehe etwa den harmonischen Fall in Abschnitt 3.1.2. Um aber auch diese Fälle in den folgenden

Betrachtungen zuzulassen, wollen wir formal einen fünften Traveling-Wave-Parameter a einführen. Dabei kann a die innere Energie U , die Entropie S oder irgendeine andere Größe sein. Allerdings setzen wir voraus, dass zwischen den Parametern r , v , k , ω und a eine algebraische Relation besteht. Diese Forderung ist sehr natürlich, da Traveling-Waves generisch durch vier Parameter beschrieben werden. Für unsere Zwecke ist es sinnvoll, diese algebraische Relation in Form einer *Dispersionsrelation* zu schreiben, welche die Frequenz ω als Funktion der anderen Parameter liefert, d.h.

$$\omega = \Omega(r, k, a). \quad (4.1.8)$$

Mit dem neuen Parameter a liest sich (4.1.7) wie folgt:

$$\tilde{\mathbb{X}}(\bar{t}, \bar{\alpha}; \varphi) = \mathbb{X}\left(\tilde{r}(\bar{t}, \bar{\alpha}), \tilde{v}(\bar{t}, \bar{\alpha}), \tilde{k}(\bar{t}, \bar{\alpha}), \tilde{\omega}(\bar{t}, \bar{\alpha}), \tilde{a}(\bar{t}, \bar{\alpha}); \varphi\right), \quad (4.1.9)$$

wobei die Dispersionsrelation (4.1.8) punktweise gilt, d.h.

$$\tilde{\omega}(\bar{t}, \bar{\alpha}) = \Omega\left(\tilde{r}(\bar{t}, \bar{\alpha}), \tilde{k}(\bar{t}, \bar{\alpha}), \tilde{a}(\bar{t}, \bar{\alpha})\right). \quad (4.1.10)$$

4.2 Die Modulationsgleichungen

4.2.1 Herleitung

In diesem Abschnitt leiten wir die so genannten *Modulationsgleichungen* für die modulierten Traveling-Wave-Parameter her, die – zumindest formal – sicherstellen, dass der Ansatz (4.1.1) approximative Lösungen der NEWTONschen Bewegungsgleichungen liefert. Dazu folgen wir einem variationstheoretischen Zugang, der ursprünglich für die Modulationstheorie partieller Differentialgleichungen entwickelt wurde, siehe [Whi74]. Später wurde diese Methode auch auf die Modulationstheorie der atomaren Kette angewendet, vgl. dazu etwa [FV99] und [DHM04].

Wir merken an, dass wir die Modulationsgleichungen mit Hilfe formaler Entwicklungen nach dem Skalierungsparameter ε ableiten. Daher werden wir im Unterkapitel 4.3 mit dem Problem der Rechtfertigung dieser Modulationsgleichungen konfrontiert sein, das wir allerdings nur in wenigen Spezialfällen zufriedenstellend lösen können. Im Kapitel 5 werden wir aber sehen, dass die numerischen Simulationen darauf hindeuten, dass die im Folgenden verwendete formale Ableitung in vielen Fällen zulässig ist.

Wie im letzten Abschnitt sei $\vec{u} = (r, v, k, \omega, a)$, und $\mathbb{X} = \mathbb{X}(\vec{u}; \cdot)$ sei wieder eine glatte Familie von Traveling-Waves, wobei die fünf Komponenten von \vec{u} durch die Dispersionsrelation (4.1.8) gekoppelt sind. Mit $\mathbb{V}(\vec{u}; \cdot)$ bzw. $\mathbb{R}(\vec{u}; \cdot)$ bezeichnen wir wieder die entsprechenden Familien von Traveling-Velocity-Waves bzw. Traveling-Distance-Waves. Außerdem nehmen wir wieder an, dass die Traveling-Wave-Parameter auf der makroskopischen Skala moduliert sind. Im Folgenden wollen wir die konstanten Parameter der Familie \mathbb{X} deutlich von den modulierten Parametern unterscheiden. Zu diesem Zweck schreiben wir

$$\vec{u} = (r, v, k, \omega, a)$$

für die konstanten Parameter, und

$$\vec{u} = (\tilde{r}, \tilde{v}, \tilde{k}, \tilde{\omega}, \tilde{a})$$

für die modulierten Parameter. Wir erinnern daran, dass die modulierten Parameter \tilde{r} und \tilde{v} bzw. \tilde{k} und $\tilde{\omega}$ die makroskopischen Ableitungen zweier Funktionen X bzw. Θ sind, vgl. (4.1.4) bzw. (4.1.5). Außerdem setzen wir wieder

$$\tilde{\mathbb{X}}(\bar{t}, \bar{\alpha}; \varphi) = \mathbb{X}(\vec{u}(\bar{t}, \bar{\alpha}); \varphi). \quad (4.2.1)$$

Gemäß (2.1.25) ist die Gesamtwirkung der atomaren Kette mit N Teilchen im mikroskopischen Zeitintervall $[0, t_{\text{end}}]$, $t_{\text{end}} = N\bar{t}_{\text{end}}$, gegeben durch

$$\mathbf{L} = \frac{1}{N^2 \bar{t}_{\text{end}}} \int_0^{t_{\text{end}}} \sum_{\alpha=1}^N \left(\frac{1}{2} v_{\alpha}(t)^2 - \Phi(r_{\alpha}(t)) \right) dt. \quad (4.2.2)$$

Wir werden nun schrittweise die rechte Seite von (4.2.2) mit Hilfe des Ansatzes (4.1.1) umformen. Dazu werden wir im Folgenden alle Terme der Ordnung $\mathcal{O}(\varepsilon)$ vernachlässigen. Wir fixieren zunächst ein α und unterteilen das mikroskopische Zeitintervall durch endlich viele Zwischenzeiten

$$t_0 = 0 < t_1 < \dots < t_i < \dots < t_M,$$

mit

$$t_{i+1} - t_i = \frac{1}{\tilde{\omega}(\varepsilon t_i, \varepsilon \alpha)} \quad \text{und} \quad t_{M-1} < t_{\text{end}} \leq t_M.$$

Beachte, dass sowohl M als auch die Zeiten t_i von α abhängen. Es gilt

$$\begin{aligned} L_{\alpha} &:= \frac{1}{N} \int_0^{t_{\text{end}}} \left(\frac{1}{2} v_{\alpha}(t)^2 - \Phi(r_{\alpha}(t)) \right) dt \\ &\approx \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{M-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \left(\frac{1}{2} v_{\alpha}(t)^2 - \Phi(r_{\alpha}(t)) \right) dt. \end{aligned} \quad (4.2.3)$$

Mit Hilfe der Gleichung (4.1.3) können wir nun die kinetischen Anteile in (4.2.3) berechnen. Es folgt

$$\begin{aligned} K_{\alpha, i} &:= \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{1}{2} v_{\alpha}(t)^2 dt \\ &= \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{1}{2} \left(\tilde{v}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) + \tilde{\omega}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) \tilde{\mathbb{V}} \left(\varepsilon t, \varepsilon \alpha; \frac{1}{\varepsilon} \Theta(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) \right) \right)^2 dt \\ &\approx \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{1}{2} \left(\tilde{v}(\varepsilon t_i, \varepsilon \alpha) + \tilde{\omega}(\varepsilon t_i, \varepsilon \alpha) \tilde{\mathbb{V}} \left(\varepsilon t_i, \varepsilon \alpha; \frac{1}{\varepsilon} \Theta(\varepsilon t_i, \varepsilon \alpha) \right) \right)^2 dt. \end{aligned}$$

Mit der Substitution $t \rightsquigarrow \varphi = \frac{1}{\varepsilon} \Theta(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)$ finden wir

$$K_{\alpha,i} = \frac{1}{2\tilde{\omega}(\varepsilon t_i, \varepsilon \alpha)} \left(\tilde{v}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)^2 + \tilde{\omega}(\varepsilon t_i, \varepsilon \alpha)^2 \int_0^1 \tilde{\mathbb{V}}(\varepsilon t_i, \varepsilon \alpha; \varphi)^2 d\varphi \right),$$

wobei wir die Periodizität der Traveling-Waves benutzt haben. Analog können die Beiträge der potentiellen Energie in (4.2.3) berechnet werden. Wir erhalten

$$\begin{aligned} W_{\alpha,i} &:= \int_{t_i}^{t_{i+1}} \Phi(r_\alpha(t)) dt \\ &\approx \frac{1}{\tilde{\omega}(\varepsilon t_i, \varepsilon \alpha)} \int_0^1 \Phi\left(\tilde{r}(\varepsilon t_i, \varepsilon \alpha) + \tilde{\mathbb{R}}(\varepsilon t_i, \varepsilon \alpha; \varphi)\right) d\varphi. \end{aligned}$$

Insgesamt gilt damit

$$\begin{aligned} L_\alpha &= \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{M-1} (K_{\alpha,i} + W_{\alpha,i}) \\ &\approx \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{M-1} \frac{1}{\tilde{\omega}(\varepsilon t_i, \varepsilon \alpha)} \left(\frac{1}{2} \tilde{v}(\varepsilon t_i, \varepsilon \alpha)^2 + \tilde{F}(\varepsilon t_i, \varepsilon \alpha) \right), \end{aligned} \quad (4.2.4)$$

wobei \tilde{F} die innere Wirkung von modulierten Traveling-Waves beschreibt, d.h. es gilt

$$\begin{aligned} \tilde{F}(\bar{t}, \bar{\alpha}) &= F\left(\vec{u}(\bar{t}, \bar{\alpha})\right), \\ F(\vec{u}) &= \int_0^1 \left(\frac{1}{2} \omega^2 \mathbb{V}(\vec{u}; \varphi)^2 - \Phi(r + \mathbb{R}(\vec{u}; \varphi)) \right) d\varphi. \end{aligned}$$

Die Summe in (4.2.4) können wir als RIEMANN-Approximation eines Integrals auffassen, so dass

$$\begin{aligned} L_\alpha &\approx \frac{1}{N} \int_0^{t_{\text{end}}} \left(\frac{1}{2} \tilde{v}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) + \tilde{F}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) \right) dt \\ &= \int_0^{\bar{t}_{\text{end}}} \left(\frac{1}{2} \tilde{v}(\bar{t}, \varepsilon \alpha) + \tilde{F}(\bar{t}, \varepsilon \alpha) \right) d\bar{t}. \end{aligned} \quad (4.2.5)$$

Schließlich können wir auch in (4.2.2) die Summe über alle α durch ein Integral ersetzen. Wir erhalten

$$\mathbf{L} = \mathbb{L}(X, \Theta, \tilde{a}) := \frac{1}{\bar{t}_{\text{end}}} \int_0^{\bar{t}_{\text{end}}} \int_0^1 L\left(\vec{u}(\bar{t}, \bar{\alpha})\right) d\bar{\alpha} d\bar{t}, \quad (4.2.6)$$

wobei die Funktion L gegeben ist durch

$$L(\vec{u}) = \mathcal{L}(\vec{u}, \mathbb{X}(\vec{u}; \cdot)) \quad (4.2.7)$$

und

$$\mathcal{L}(\vec{u}, \mathbb{X}) = \int_0^1 \left(\frac{1}{2} (v + \omega \mathbb{X}'(\varphi))^2 - \Phi(r + \nabla_k \mathbb{X}(\varphi)) \right) d\varphi. \quad (4.2.8)$$

Beachte, dass in der Definition von \mathcal{L} die Funktion \mathbb{X} für ein beliebiges Element aus $L^2([0, 1])$ steht. Außerdem bezeichnet „ \prime “ die Ableitung nach φ , und ∇_k ist gegeben durch

$$(\nabla_k \mathbb{X})(\varphi) = \mathbb{X}(\varphi + k) - \mathbb{X}(\varphi). \quad (4.2.9)$$

Die Modulationsgleichungen resultieren, wenn wir das Prinzip der kleinsten Wirkung auf das Wirkungsfunktional $\mathbb{L}(X, \Theta, \tilde{a})$ anwenden, d.h. wir setzen

$$\partial_X \mathbb{L}(X, \Theta, \tilde{a}) = 0 \quad \text{und} \quad \partial_\Theta \mathbb{L}(X, \Theta, \tilde{a}) = 0. \quad (4.2.10)$$

Die Variationen bzgl. X bzw. Θ liefern

$$0 = \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \partial_v L(\vec{u}(\bar{t}, \bar{\alpha})) + \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} \partial_r L(\vec{u}(\bar{t}, \bar{\alpha})) \quad (4.2.11)$$

bzw.

$$0 = \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \partial_\omega L(\vec{u}(\bar{t}, \bar{\alpha})) + \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} \partial_k L(\vec{u}(\bar{t}, \bar{\alpha})). \quad (4.2.12)$$

Außerdem folgen aus (4.1.4)–(4.1.5) unmittelbar die beiden Kompatibilitätsbedingungen

$$\frac{\partial \tilde{r}}{\partial \bar{t}}(\bar{t}, \bar{\alpha}) = \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \bar{\alpha}}(\bar{t}, \bar{\alpha}), \quad \frac{\partial \tilde{k}}{\partial \bar{t}}(\bar{t}, \bar{\alpha}) = \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial \bar{\alpha}}(\bar{t}, \bar{\alpha}). \quad (4.2.13)$$

In dieser Form wurden die Modulationsgleichungen der atomaren Kette bereits von FILIP und VENAKIDES in [FV99] abgeleitet.

In einem zweiten Schritt wollen wir die Rolle der Dispersionsrelation ausführlicher studieren. Die GATEAUX- Ableitung des Funktional \mathcal{L} bzgl. der Variable $\mathbb{X} \in L^2([0, 1])$ ist gegeben durch

$$\partial_{\mathbb{X}} \mathcal{L}(\vec{u}, \mathbb{X}) = -\omega^2 \mathbb{X}'' - \nabla_k^* \partial \Phi(r + \nabla_k \mathbb{X}), \quad (4.2.14)$$

wobei ∇_k^* der adjungierte Operator zu ∇_k ist, d.h.

$$(\nabla_k^* \mathbb{X})(\varphi) = -\mathbb{X}(\varphi) + \mathbb{X}(\varphi - k). \quad (4.2.15)$$

Wie wir sehen, ist Gleichung (4.2.14) gerade die Traveling-Wave-Gleichung (3.1.4) mit freiem Parameter ω . Nach Konstruktion erfüllt die Familie $\mathbb{X}(\vec{u}; \cdot)$ die Gleichung (4.2.14), sofern wir die Frequenz ω durch die Dispersionsrelation ersetzen, d.h.

$$\partial_{\mathbb{X}} \mathcal{L}(\vec{u}, \mathbb{X}(\vec{u}; \cdot)) = (\Omega^2(r, k, a) - \omega^2) \mathbb{X}(\vec{u}; \cdot)'''. \quad (4.2.16)$$

Da \mathcal{L} nicht explizit von a abhängt, finden wir

$$\begin{aligned}
 \partial_a L(\vec{u}) &= \int_0^1 \partial_{\mathbb{X}} \mathcal{L}(\vec{u}, \mathbb{X}(\vec{u}; \varphi)) \partial_a \mathbb{X}(\vec{u}; \varphi) \, d\varphi \\
 &= -(\Omega^2(r, k, a) - \omega^2) \int_0^1 \mathbb{X}'(\vec{u}; \varphi) \partial_a \mathbb{X}'(\vec{u}; \varphi) \, d\varphi \\
 &= -(\Omega^2(r, k, a) - \omega^2) \partial_a \left(\frac{1}{2} \int_0^1 (\mathbb{X}'(\vec{u}; \varphi))^2 \, d\varphi \right) \\
 &= -(\Omega^2(r, k, a) - \omega^2) \partial_a \gamma(\vec{u}).
 \end{aligned} \tag{4.2.17}$$

Wir schließen, zumindest für $\partial_a \gamma(\vec{u}) \neq 0$, dass die Dispersionsrelation (4.1.10) wie folgt geschrieben werden kann:

$$\partial_a L(\vec{u}) = 0 \quad \text{oder auch} \quad \partial_{\tilde{a}} \mathbb{L}(X, \Theta, \tilde{a}) = 0. \tag{4.2.18}$$

Damit haben wir auch die Dispersionsrelation (4.1.8) mit Hilfe der Funktion L ausgedrückt.

Im letzten Schritt wollen wir die Verbindung zu den thermodynamischen Größen aus Unterkapitel 3.2 herstellen. Zunächst bemerken wir, dass die Funktion L die Summe der makroskopischen kinetischen Energie und der inneren Wirkung F ist, d.h. es gilt

$$L(\vec{u}) = \frac{1}{2} v^2 + F(\vec{u}). \tag{4.2.19}$$

Diese Gleichheit kann mit Hilfe der Definitionen aus Abschnitt (3.1.1) direkt aus (4.2.8) abgelesen werden. Wie wir bereits gesehen haben, impliziert die Dispersionsrelation die Gleichung

$$\partial_{\mathbb{X}} \mathcal{L}(\vec{u}, \mathbb{X}(\vec{u}; \cdot)) = 0, \tag{4.2.20}$$

und damit für alle $y \in \{r, v, k, \omega, a\}$ auch

$$\partial_y L(\vec{u}) = \partial_y \mathcal{L}(\vec{u}, \mathbb{X}(\vec{u}; \cdot)). \tag{4.2.21}$$

Analog zu den Betrachtungen aus Unterkapitel 3.2 folgt nun

$$\begin{aligned}
 \partial_r L(\vec{u}) &= - \int_0^1 \partial \Phi(r + \nabla_k \mathbb{X}(\vec{u}; \varphi)) \, d\varphi \\
 &= - \int_0^1 \partial \Phi(r + \mathbb{R}(\vec{u}; \varphi)) \, d\varphi,
 \end{aligned} \tag{4.2.22}$$

$$\partial_v L(\vec{u}) = + \int_0^1 (v + \omega \mathbb{X}'(\vec{u}; \varphi)) \, d\varphi = v, \tag{4.2.23}$$

$$\begin{aligned}
\partial_k L(\vec{u}) &= - \int_0^1 \partial \Phi(r + \nabla_k \mathbb{X}(\vec{u}; \varphi)) \mathbb{X}'(\vec{u}; \varphi + k) d\varphi \\
&= - \int_0^1 \partial \Phi(r + \mathbb{R}(\vec{u}; \varphi)) (B_k \mathbb{V})(\vec{u}; \varphi) d\varphi,
\end{aligned} \tag{4.2.24}$$

$$\begin{aligned}
\partial_\omega L(\vec{u}) &= + \int_0^1 (v + \omega \mathbb{X}'(\vec{u}; \varphi)) \mathbb{X}'(\vec{u}; \varphi) d\varphi \\
&= \omega \int_0^1 \mathbb{V}(\vec{u}; \varphi)^2 d\varphi.
\end{aligned} \tag{4.2.25}$$

Schließlich erhalten wir

$$\partial_r L(\vec{u}) = p(\vec{u}), \quad \partial_v L(\vec{u}) = v, \quad \partial_k L(\vec{u}) = g(\vec{u}), \quad \partial_\omega L(\vec{u}) = S(\vec{u}),$$

so dass wir das System (4.2.11)–(4.2.13) auch wie folgt schreiben können:

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} \begin{pmatrix} \tilde{r} \\ \tilde{v} \\ \tilde{k} \\ \tilde{S}(\vec{u}) \end{pmatrix} (\bar{t}, \bar{\alpha}) + \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} \begin{pmatrix} -\tilde{v} \\ +p(\vec{u}) \\ -\tilde{\omega} \\ +g(\vec{u}) \end{pmatrix} (\bar{t}, \bar{\alpha}) = 0. \tag{4.2.26}$$

Beachte, dass wir hier die Frequenz $\tilde{\omega}$ zunächst nicht durch die algebraische Dispersionsrelation (4.1.10) ersetzt haben.

4.2.2 Eigenschaften, Interpretation

Im letzten Abschnitt haben wir die Modulationsgleichungen in Form vier partieller Differentialgleichungen mit algebraischer Dispersionsrelation hergeleitet. Entsprechend Abschnitt 3.1.1 können wir die vier Gleichungen (4.2.26) als die makroskopischen Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls, Wellenzahl und Entropie interpretieren.

Wir werden nun verschiedene Möglichkeiten der Wahl des zusätzlichen Parameters a betrachten. Um dabei eine möglichst kompakte Notation zu erreichen, wollen wir von jetzt an auf die Schlange „ \sim “ über den modulierten Parametern verzichten.

Zuerst nehmen wir an, dass wir die Traveling-Waves vollständig durch r , v , k und ω parametrisieren können. In diesem Fall kann $a = \omega$ gesetzt werden, so dass die Dispersionsrelation (4.1.8) trivial wird, d.h.

$$\Omega(r, k, a) = a = \omega. \tag{4.2.27}$$

Das System der Modulationsgleichungen ist weiterhin durch (4.2.26) gegeben, wobei alle konstitutiven Gesetze durch die GIBBS-Gleichung (3.2.11) bestimmt sind, d.h. es gilt

$$dF = S d\omega + g dk + p dr. \tag{4.2.28}$$

Als nächstes wollen wir den Fall betrachten, dass die Traveling-Waves durch r , v , k und S parametrisierbar sind, d.h. es gilt $a = S$. Gemäß Abschnitt 3.2.4 schreibt sich die Dispersionsrelation mit Hilfe der inneren Energie U als

$$\omega = \Omega(r, k, S) = \partial_S U(r, k, S). \quad (4.2.29)$$

In (4.2.26) sind nun alle Dichten die unabhängigen Variablen, während alle Flüsse durch konstitutive Gesetze gegeben sind, die aus GIBBS-Gleichung

$$dE = \omega dS - g dk - p dr + v dv \quad (4.2.30)$$

abgelesen werden können. Wir erinnern daran, dass sich die Gesamtenergie E wie folgt berechnet:

$$E(r, v, k, S) = \frac{1}{2}v^2 + U(r, k, S). \quad (4.2.31)$$

Das System (4.2.26) ist deshalb äquivalent zu

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} \vec{u} + B \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} \partial_{\bar{\alpha}} E(\vec{u}) = 0, \quad (4.2.32)$$

wobei

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} r \\ v \\ k \\ S \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.2.33)$$

Theorem 4.2.1 *Sei eine glatte Lösung von (4.2.32) gegeben. Dann gilt:*

1. *Die Energie E bleibt erhalten gemäß*

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} E + \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} (p v + g \omega) = 0. \quad (4.2.34)$$

2. *Es gibt eine weitere Erhaltungsgleichung, nämlich*

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} (r v + k S) - \frac{\partial E^*}{\partial \bar{\alpha}} = 0, \quad (4.2.35)$$

wobei E^* die LEGENDRE-Transformierte von E bzgl. aller Variablen ist, d.h. es gilt

$$E^* = -r p + v^2 - k g + \omega S - E. \quad (4.2.36)$$

Beweis: Mit Hilfe von (4.2.26) sowie der GIBBS-Gleichung (4.2.30) erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial \bar{t}} &= \omega \frac{\partial S}{\partial \bar{t}} - g \frac{\partial k}{\partial \bar{t}} - p \frac{\partial r}{\partial \bar{t}} + v \frac{\partial v}{\partial \bar{t}} \\ &= -\omega \frac{\partial g}{\partial \bar{\alpha}} - g \frac{\partial \omega}{\partial \bar{\alpha}} - p \frac{\partial v}{\partial \bar{\alpha}} - v \frac{\partial p}{\partial \bar{\alpha}} \\ &= -\frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} (\omega g + p v). \end{aligned} \quad (4.2.37)$$

Sei nun E^* wie in (4.2.36) gegeben. Dann gilt

$$dE^* = S d\omega - r dp - k dg + v dv \quad (4.2.38)$$

und damit auch

$$\begin{aligned} \frac{\partial E^*}{\partial \bar{\alpha}} &= S \frac{\partial \omega}{\partial \bar{\alpha}} - r \frac{\partial p}{\partial \bar{\alpha}} - k \frac{\partial g}{\partial \bar{\alpha}} + v \frac{\partial v}{\partial \bar{\alpha}} \\ &= S \frac{\partial k}{\partial \bar{t}} + r \frac{\partial v}{\partial \bar{t}} + k \frac{\partial S}{\partial \bar{t}} + v \frac{\partial r}{\partial \bar{t}} \\ &= \frac{\partial}{\partial \bar{t}} (rv + kS). \end{aligned} \quad (4.2.39)$$

□

Wir haben nun schließlich auch den Erhaltungssatz für die Energie abgeleitet, dessen Gültigkeit aus physikalischer Sicht auch zu erwarten war. Darüber hinaus haben wir einen weiteren Erhaltungssatz identifiziert, für den wir allerdings keine physikalische Interpretation besitzen.

Obwohl wir die makroskopischen Evolutionsgleichungen für die modulierten Parameter abgeleitet haben, bleiben wesentliche Fragen offen, da viele Eigenschaften der Systeme (4.2.26) und (4.2.32) von den Zustandsgleichungen

$$F = F(r, k, \omega) \quad \text{bzw.} \quad U = U(r, k, S)$$

abhängen. Da wir die Zustandsgleichungen für allgemeine Wechselwirkungspotentiale nicht vollständig verstanden haben, bleibt die qualitative Charakterisierung von (4.2.26) und (4.2.32) ein im Allgemeinen offenes Problem. Insbesondere können wir im Allgemeinen nicht entscheiden, ob die Systeme hyperbolisch oder gar strikt hyperbolisch sind. Infolgedessen bleibt auch die allgemeine Struktur der Lösungen von RIEMANN-Problemen unbestimmt.

Aus diesem Grund werden wir im folgenden Abschnitt zu den Modellen aus Abschnitt 2.1.4 zurückkehren, für die wir die Zustandsgleichungen explizit kennen und deshalb auch die Eigenschaften der Modulationsgleichungen explizit angeben können. Darüber hinaus werden wir im Kapitel 5 einige RIEMANN-Probleme der atomaren Kette numerisch berechnen.

Zum Abschluss dieses Abschnitts wollen wir noch einmal zur Interpretation von S als Entropie zurückkehren. In Abschnitt 3.2.7 hatten wir auf Grund der GIBBS-Gleichung (3.2.24) gesehen, dass im Gleichgewicht $k = 1/2$ die Größen S und ω als thermodynamische Entropie und als thermodynamische Temperatur interpretiert werden können; wir hatten darüber hinaus gezeigt, dass auch $\log S$ und T diese Eigenschaft besitzen.

Nun wissen wir außerdem, dass S einer Erhaltungsgleichung genügt, wobei g gerade der Fluss zu S ist. Es ist leicht einzusehen, dass für $\log S$ nur dann ein Erhaltungssatz gilt, falls g nur von S , aber nicht von k und r abhängt. Unsere Modellbeispiele zeigen aber, dass dies im Allgemeinen nicht zu erwarten ist. Da aber in den thermodynamischen Feldtheorien

üblicherweise die Entropieerhaltung eine wichtige Rolle spielt (zumindest in Abwesenheit von Stößen), können wir nur S , aber nicht $\log S$, konsistent als Entropie interpretieren. Dafür nehmen wir in Kauf, dass wir zwischen der thermodynamischen Temperatur ω und der kinetischen Temperatur T unterscheiden müssen. Ein letztes, aber nicht unwesentliches Indiz für die Richtigkeit unserer Interpretation liefert der Wärmefluss q , den wir aus (4.2.34) als $q = \omega g$ ablesen, d.h. der Wärmefluss ist das Produkt aus Entropiefluss und thermodynamischer Temperatur. Dieser Zusammenhang ist in der Thermodynamik als CLAUSIUS-DUHEM-Gesetz bekannt.

4.2.3 Die Modulationsgleichungen der Modelle A , B und C

Wir wollen nun die Modulationsgleichungen für die drei Modellbeispiele aus Abschnitt 2.1.4 explizit angeben. Dies gelingt, da wir in Abschnitt 3.2.6 die Zustandsgleichungen explizit ableiten konnten.

Modell A : Die harmonische Kette

Theorem 4.2.2 *Für das harmonische Wechselwirkungspotential (2.1.13) resultieren die folgenden Modulationsgleichungen*

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} \begin{pmatrix} r \\ v \\ k \\ S \end{pmatrix} (\bar{t}, \bar{\alpha}) - \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} \begin{pmatrix} v \\ c_0^2 r \\ \Omega(k) \\ \Omega'(k)S \end{pmatrix} (\bar{t}, \bar{\alpha}) = 0. \quad (4.2.40)$$

Hierbei ist $\Omega(k)$ die harmonische Dispersionsrelation, d.h. es gilt

$$\Omega(k) = \frac{c_0 \sin(\pi k)}{\pi}. \quad (4.2.41)$$

Das System (4.2.40) ist hyperbolisch mit den charakteristischen Geschwindigkeiten

$$\lambda_1 = +c_0, \quad \lambda_2 = -c_0, \quad \text{und} \quad \lambda_{3,4} = \Omega'(k),$$

wobei der algebraisch doppelte Eigenwert geometrisch einfach ist. Außerdem sind alle Eigenwerte linear entartet.

Beweis: Das System (4.2.40) kann direkt aus (4.2.26) mit Hilfe der Formeln (3.1.34)–(3.1.36) abgeleitet werden. Die anderen Behauptungen können leicht nachgerechnet werden. \square

Wir bemerken, dass das System (4.2.40) in zwei unabhängige Teilsysteme zerfällt, wobei das erste die Evolution von Masse und Impuls und das zweite die Evolution von Wellenzahl und Entropie beschreibt. Außerdem gibt es zwei partielle Erhaltungssätze für die Energie, nämlich

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} \left(\frac{1}{2} v^2 + \frac{c_0^2}{2} r^2 \right) (\bar{t}, \bar{\alpha}) - \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} (c_0^2 r v) (\bar{t}, \bar{\alpha}) = 0 \quad (4.2.42)$$

und

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} \left(\Omega(k) S \right) (\bar{t}, \bar{\alpha}) - \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} \left(\Omega(k) \Omega'(k) S \right) (\bar{t}, \bar{\alpha}) = 0. \quad (4.2.43)$$

Die Summe beider Gleichungen ist gerade die Erhaltungsgleichung für die Gesamtenergie E .

Modelle B und C

Im Folgenden ist es wichtig, dass wir die Wellenzahl k auf das offene Intervall $(0, 1)$ beschränkt haben, da andernfalls einige Terme singulär wären.

Theorem 4.2.3 *Für das Billard-Modell der atomaren Kette (2.1.13) haben Modulationsgleichungen in Glattheitspunkten die folgende Gestalt:*

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} \vec{u} + C(\vec{u}) \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} \vec{u} = 0, \quad (4.2.44)$$

wobei $\vec{u} = (r, v, k, \omega)^T$ und

$$C(\vec{u}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ \frac{\omega^2}{k(1-k)} & 0 & -\frac{(1-2k)(r-r_0)\omega^2}{k^2(1-k)^2} & \frac{2(r-r_0)\omega}{k(1-k)} \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -\frac{(1-2k)\omega^2}{(r-r_0)k(1-k)} & \frac{2\omega}{(r-r_0)} & \frac{(1-4k(1-k))\omega^2}{k^2(1-k)^2} & -\frac{(1-2k)\omega}{k(1-k)} \end{pmatrix}. \quad (4.2.45)$$

Das System ist hyperbolisch mit zwei Eigenwerten

$$\lambda_1 = -\frac{\omega}{k}, \quad \lambda_2 = \frac{\omega}{1-k}, \quad (4.2.46)$$

die algebraisch zweifach, geometrisch einfach und darüber hinaus auch linear entartet sind.

Beweis: Alle Behauptungen können analog zu denen des folgenden Theorems 4.2.4 bewiesen werden. \square

Theorem 4.2.4 *Es sei $\vec{u} = (r, v, k, \omega)^T$. Unter der Bedingung (3.1.43), d.h. solange*

$$\pi\delta^{-1}\omega \leq \min\{k, 1-k\}, \quad (4.2.47)$$

sind die Modulationsgleichungen für das Modell C in Glattheitspunkten durch

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} \vec{u} + A^{-1}(\vec{u}) B(\vec{u}) \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} \vec{u} = 0 \quad (4.2.48)$$

gegeben. Hierbei gilt $\vec{u} = (r, v, k, \omega)^T$, $\kappa := 2k(1-k) - \pi\delta^{-1}\omega$ und

$$A(\vec{u}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \frac{2r\omega(4k(1-k) - \pi\delta^{-1}\omega)}{\kappa^2} & 0 & \frac{8r^2\omega k(1-k)(1-2k)}{\kappa^3} & \frac{8r^2k^2(1-k)^2}{\kappa^3} \end{pmatrix}, \quad (4.2.49)$$

$$B(\vec{u}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ \frac{2\omega^2}{\kappa} & 1 & -\frac{4r\omega^2(1-2k)}{\kappa^2} & \frac{2r\omega(4k(1-k) - \pi\delta^{-1}\omega)}{\kappa^2} \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -\frac{4r\omega^2(1-2k)}{\kappa^2} & 0 & \frac{4r^2\omega^2(2-6(1-k) - \pi\delta^{-1}\omega)}{\kappa^3} & -\frac{8r^2\omega k(1-k)(1-2k)}{\kappa^3} \end{pmatrix}.$$

Das System ist hyperbolisch mit zwei Eigenwerten

$$\lambda_1 = -\frac{\omega}{k}, \quad \lambda_2 = \frac{\omega}{1-k}, \quad (4.2.50)$$

die algebraisch zweifach, geometrisch einfach und darüber hinaus auch linear entartet sind.

Beweis: Die Matrizen A und B können direkt aus (4.2.26) mit Hilfe von (3.1.44) berechnet werden. Das charakteristische Polynom P_C von $C := A^{-1}B$ ergibt sich zu

$$P_C(\lambda) = \frac{(\omega + k\lambda)^2(\omega - (1-k)\lambda)^2}{k^2(1-k)^2}. \quad (4.2.51)$$

Insbesondere besitzt (4.2.48) die beiden algebraisch zweifachen Eigenwerte (4.2.50). Beide Eigenwerte sind geometrisch einfach mit den rechtsseitigen Eigenvektoren

$$\begin{aligned} R_1(\vec{u}) &= \left(c_1, c_1 \frac{\omega}{k}, 1, \frac{\omega}{k} \right)^T, \quad c_1 = -\frac{2(r - r_{\min})k}{2k(1-k) - \pi\delta^{-1}\omega}, \\ R_2(\vec{u}) &= \left(c_2, -c_2 \frac{\omega}{1-k}, 1, -\frac{\omega}{1-k} \right)^T, \quad c_2 = \frac{2(r - r_{\min})(1-k)}{2k(1-k) - \pi\delta^{-1}\omega}. \end{aligned}$$

Für $i = 1, 2$ kann leicht nachgerechnet werden, das R_i senkrecht auf dem Gradienten von λ_i steht. Deshalb sind beide Eigenwerte linear entartet. \square

Leider sind auch für die Modelle B und C die Modulationsgleichungen wieder entartet. Insbesondere gibt es für $k \in (0, 1)$ keine Verdünnungswellen, da alle Eigenwerte linear entartet sind (vgl. dazu Anhang A). Dafür gibt es allerdings stetige makroskopische Traveling-Waves. Wir formulieren zwei entsprechende Resultate für das Modell C und weisen darauf hin, das wir analoge Ergebnisse für das Modell B erhalten, wenn wir formal $\delta = \infty$ setzen.

Lemma 4.2.5 *Sei $c > 0$ eine hinreichend kleine Konstante, sei \hat{k} eine glatte Funktion auf der reellen Achse mit Werten in $(0, 1)$, und sei $\hat{\omega} = c(1 - \hat{k})$. Außerdem seien die Funktionen \hat{r} und \hat{v} Lösungen von*

$$\hat{r}' = \hat{k}' \frac{2(\hat{r} - r_0)(1 - \hat{k})}{2\hat{k}(1 - \hat{k}) - \pi\delta^{-1}\hat{\omega}} \quad \text{und} \quad \hat{v}' = -c\hat{r}',$$

mit $\hat{r} > r_0$. Dann ist die Funktion

$$\vec{u}(\bar{t}, \bar{\alpha}) := \vec{u}(\bar{\alpha} - c\bar{t}) \quad \text{mit} \quad \vec{u} = \left(\hat{r}, \hat{v}, \hat{k}, \hat{\omega} \right)^T \quad (4.2.52)$$

eine Lösung von (4.2.48).

Beweis: Setzen wir den Ansatz (4.2.52) in (4.2.48) ein, so erhalten wir

$$-c\vec{u}' + C(\vec{u})\vec{u}' = 0, \quad (4.2.53)$$

wobei $C(\vec{u}) := A^{-1}(\vec{u})B(\vec{u})$. Wir schließen, dass \vec{u}' punktweise Eigenvektor zum Eigenwert c sein muss. Nach Konstruktion ist die Funktion $\lambda_2(\vec{u})$ konstant mit Wert c . Mit Hilfe der

Formel für R_2 aus dem Beweis von Theorem 4.2.4 kann nun leicht gezeigt werden, dass \vec{u}' punktweise proportional zu $R_2(\vec{u})$ ist. \square

Damit haben wir makroskopische Traveling-Waves konstruiert, die sich mit Geschwindigkeit c bewegen. Die Kleinheitsbedingung für c ist dabei notwendig, um die Bedingung (4.2.47) zu erfüllen. Zur Konstruktion von makroskopischen Traveling-Waves für negative c verfahren wir analog.

Lemma 4.2.6 *Sei $c < 0$ eine Konstante, die hinreichend nahe bei Null liegt, sei \hat{k} eine glatte Funktion auf der reellen Achse mit Werten in $(0, 1)$, und sei $\hat{\omega} = -c\hat{k}$. Außerdem seien die Funktionen \hat{r} und \hat{v} Lösungen von*

$$\hat{r}' = -\hat{k}' \frac{2(\hat{r} - r_{\min})\hat{k}}{2\hat{k}(1 - \hat{k}) - \pi\delta^{-1}\hat{\omega}} \quad \text{und} \quad \hat{v}' = -c\hat{r}',$$

mit $\hat{r} > r_0$. Dann ist die Funktion

$$\vec{u}(\bar{t}, \bar{\alpha}) := \vec{u}(\bar{\alpha} - c\bar{t}) \quad \text{mit} \quad \vec{u} = (\hat{r}, \hat{v}, \hat{k}, \hat{\omega})^T \quad (4.2.54)$$

eine Lösung von (4.2.48).

Beweis: Analog zu Lemma 4.2.6, mit λ_1 statt λ_2 und R_1 statt R_2 . \square

4.3 Rechtfertigung der Modulationsgleichungen

4.3.1 Allgemeiner Fall

Im Unterkapitel 4.2 haben wir die Modulationsgleichungen mit Hilfe formaler Entwicklungen nach dem Kleinheitsparameter ε hergeleitet. Daher sind wir mit dem Problem konfrontiert, ob und wie die Modulationsgleichungen rigoros begründet werden können.

Für die harmonische Kette können die entsprechenden Modulationsgleichungen (4.2.40) mit Hilfe von WIGNER-Maßen abgeleitet werden (vergleiche [Mie04], [Mac03]). Wir wollen hier aber eine andere Möglichkeit der Rechtfertigung diskutieren, die auch für die nicht-lineare Kette anwendbar ist. Wir werden dazu zunächst eine allgemeine Vermutung formulieren, die wir dann im nächsten Abschnitt für das Billard-Modell auch beweisen können.

Wir betrachten wieder eine Familie von Traveling-Waves, die auf einer offenen Menge \mathcal{D} definiert sind

$$\mathbb{R}(\vec{u}; \cdot), \mathbb{V}(\vec{u}; \cdot) : \mathcal{D} \rightarrow L^2([0, 1]). \quad (4.3.1)$$

Hierbei steht \vec{u} für irgendeinen Satz von vier Parametern. Die entsprechenden Modulationsgleichungen (4.2.26)/(4.2.32) schreiben wir in diesem Abschnitt wie folgt:

$$A(\vec{u}) \frac{\partial \vec{u}}{\partial \bar{t}} + B(\vec{u}) \frac{\partial \vec{u}}{\partial \bar{\alpha}} = 0. \quad (4.3.2)$$

Wir erinnern daran, dass die Matrixfunktionen A und B mit Hilfe der Traveling-Wave-Profilfunktionen aus (4.3.1) definiert sind.

Die grundlegende Idee wird im Folgenden sein, aus glatten Lösungen von (4.3.2), deren Existenz wir voraussetzen, approximative Lösungen der NEWTONschen Bewegungsgleichungen zu konstruieren. Um die Darstellung möglichst einfach zu halten, wollen wir nur solche Lösungen von (4.3.2) betrachten, die darüber hinaus 1-periodisch in $\bar{\alpha}$ sind.

Wir können nur dann erwarten, dass das System (4.3.2) den thermodynamischen Limes der atomaren Kette beschreibt, wenn zumindest zwei Bedingungen erfüllt sind:

1. Auf der makroskopischen Skala ist das System (4.3.2) wirklich ein System von *Evolutionsgleichungen*, d.h. das Anfangswertproblem ist gut gestellt.
2. Die exakten Traveling-Wave-Lösungen sind auf der mikroskopischen Skala *stabil*.

Wir definieren daher zwei Mengen \mathcal{M}_{hyp} und $\mathcal{M}_{\text{stab}}$ durch

1. $\vec{u} \in \mathcal{M}_{\text{hyp}}$, sofern die Modulationsgleichungen (4.3.2) *hyperbolisch* in \vec{u} sind,
2. $\vec{u} \in \mathcal{M}_{\text{stab}}$, falls die exakte Traveling-Wave zu den Parametern \vec{u} linear stabil für große N ist.

Außerdem setzen wir

$$\mathcal{M} := \mathcal{M}_{\text{hyp}} \cup \mathcal{M}_{\text{stab}}. \quad (4.3.3)$$

Die Struktur dieser Mengen ist allerdings nicht vollständig verstanden:

1. Die Hyperbolizität von (4.3.2) hängt von den Zustandsgleichungen

$$U = U(r, k, S) \quad \text{bzw.} \quad F = F(r, k, \omega), \quad (4.3.4)$$

ab, die im Allgemeinen unbekannt sind. Nur für ganz spezielle Potentiale oder kleine Amplituden sind bisher exakte Darstellungen verfügbar (siehe Abschnitt 3.2.6 und [DHM04]).

2. Exakte Stabilitätsresultate für Traveling-Waves sind bisher nur für kleine Amplituden verfügbar ([Fla96]). Für große Amplituden könnten erste Resultate numerisch gewonnen werden, siehe dazu auch [DH04].
3. Auf einem formalen Level kann ein Zusammenhang zwischen Stabilität von Traveling-Waves und Hyperbolizität der Modulationsgleichungen erwartet werden. Vergleiche dazu die Diskussion in [DHM04].

Wir wollen voraussetzen, dass – zumindest für kleine makroskopische Zeiten – eine hinreichend glatte Lösung $\vec{u} = \vec{u}(\bar{t}, \bar{\alpha})$ von (4.3.2) existiert, die Werte in \mathcal{M} annimmt. Dann

können wir für festes N die glatte Lösung von (4.3.2) in die Ansätze (4.1.2) und (4.1.3) für eine modulierte Traveling-Wave einsetzen:

$$Q_\alpha^N(t) = \begin{pmatrix} \tilde{r}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) + \mathbb{R}\left(\vec{\tilde{u}}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha); \frac{1}{\varepsilon}\Theta(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) + \frac{1}{2}\tilde{k}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right) \\ \tilde{v}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) + \tilde{\omega}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\mathbb{V}\left(\vec{\tilde{u}}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha); \frac{1}{\varepsilon}\Theta(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right) \end{pmatrix}, \quad (4.3.5)$$

Hierbei gilt $Q = (r, v)^T$, $\varepsilon = 1/N$, und Θ ist die modulierte Phase ist, d.h.

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} \Theta(\bar{t}, \bar{\alpha}) = \tilde{\omega}(\bar{t}, \bar{\alpha}) \quad \text{und} \quad \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} \Theta(\bar{t}, \bar{\alpha}) = \tilde{k}(\bar{t}, \bar{\alpha}). \quad (4.3.6)$$

Mit $Q^N(t) = (Q_\alpha^N(t))_{\alpha=1\dots N}$ haben wir nun einen Kandidaten für eine approximative Lösung identifiziert. Mit $P^N(t) = (P_\alpha^N(t))_{\alpha=1\dots N}$ wollen wir eine exakte Lösung der NEWTONschen Bewegungsgleichungen bezeichnen, von der wir erwarten, dass sie nahe bei der approximativen Lösung liegt. Im einfachsten Fall kann $P^N(t)$ durch die Anfangsbedingung

$$P_\alpha^N(0) = Q_\alpha^N(0) \quad (4.3.7)$$

festgelegt werden. Um die Differenz zwischen exakter und approximativer Lösung abzuschätzen, betrachten wir die Räume

$$Y_N^s := \ell^s(N) \times \ell^s(N), \quad 1 \leq s \leq \infty. \quad (4.3.8)$$

Die Räume Y_N^∞ statten wir mit der üblichen Supremumsnorm aus, während wir für $s < \infty$ die Norm wie folgt definieren

$$\left\| \begin{pmatrix} r \\ v \end{pmatrix} \right\|_{Y_N^s} := \left(\frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N (|r_\alpha| + |v_\alpha|)^s \right)^{\frac{1}{s}} \quad (4.3.9)$$

Beachte, dass Y_N^s als Diskretisierung des Raumes

$$Y^s := L^s([0, 1]) \times L^s([0, 1]) \quad (4.3.10)$$

betrachtet werden kann. Wir formulieren nun eine Vermutung, die, sofern sie bewiesen werden kann, das Rechtfertigungsproblem löst.

Vermutung 4.3.1 *Sei $\vec{\tilde{u}} = \vec{\tilde{u}}(\bar{t}, \bar{\alpha})$ eine hinreichend glatte Lösung von (4.3.2), die Werte in der Menge \mathcal{M} annimmt, und die in einem makroskopischen Zeitintervall $[0, \bar{t}_{\text{end}}]$ definiert ist. Dann existieren ein $1 \leq s \leq \infty$, eine Konstante C und ein Exponent $\mu > 0$, so dass für jedes $N < \infty$ und für alle mikroskopischen Zeiten $t \leq N\bar{t}_{\text{end}}$ gilt*

$$\|Q^N(t) - P^N(t)\|_{Y_N^s} \leq C \left(\frac{1}{N} \right)^\mu. \quad (4.3.11)$$

Unsere Strategie ist also, die Modulationsgleichungen durch den Nachweis zu rechtfertigen, dass (4.3.5) approximative Lösungen im Sinne von (4.3.11) liefert. Mit analogen Strategien konnten Modulationsgleichungen schon in anderen Situationen rigoros gerechtfertigt werden. Vergleiche dazu [SW00] und [GM04a, GM04b]. Schließlich erwähnen wir, dass in [DHM04] die Vermutung (4.3.1) für die harmonische Kette bewiesen wurde.

4.3.2 Rechtfertigung für das Billard-Modell

In diesem Abschnitt wollen wir die Modulationsgleichungen für das Billard-Modell der atomaren Kette rechtfertigen. Dazu wollen wir uns auf den Fall $r_0 = 0$ beschränken, da sich dadurch einige Argumente wesentlich vereinfachen werden. Allerdings schränkt diese Annahme nicht die Gültigkeit der Ergebnisse ein, da wir den Fall $r_0 \neq 0$ immer mit der Transformation

$$r_\alpha(t) \mapsto \check{r}_\alpha(t) := r_\alpha(t) - r_0 \quad (4.3.12)$$

auf den Fall $r_0 = 0$ zurückführen können.

Der erste Schritt zur Rechtfertigung der Modulationsgleichungen für das Billard-Modell ist der Wechsel von dem bisher bevorzugten LAGRANGE-Bild zum EULER-Bild, da dort sowohl die mikroskopische Dynamik (Abschnitte 4.3.2.1 und 4.3.2.2) als auch die Modulationsgleichungen (Abschnitt 4.3.2.4) besonders einfach zu beschreiben sind. Im zweiten Schritt werden wir in Abschnitt 4.3.2.6 das Rechtfertigungsergebnis beweisen.

4.3.2.1 Die mikroskopische Dynamik im EULER-Bild

Die Dynamik des Billard-Modells kann, sofern nur Zwei-Teilchen-Kollisionen auftreten, im mikroskopischen EULER-Bild wie folgt charakterisiert werden (vgl. auch Abbildung 4.1):

1. Da wir $r_0 = 0$ gesetzt haben, können die atomaren Abstände r_α für alle Zeiten nicht negativ sein. Solange die Abstände $r_{\alpha-1}$ und r_α positiv sind, bewegt sich das Teilchen α auf einer *Freiflugbahn*.
2. Ist der Abstand r_α zu einer Zeit gleich Null, so wechselwirken die Teilchen α und $\alpha+1$ durch einen elastischen Stoß miteinander, d.h. sie vertauschen ihre Geschwindigkeit. Nach der Kollision bewegt sich das Teilchen $\alpha+1$ (bzw. α) auf der Freiflugbahn weiter, auf der sich vorher das Teilchen α (bzw. $\alpha+1$) bewegt hat.
3. Die Freiflugbahnen, auf denen sich die Teilchen bewegen, sind eindeutig durch die Anfangspositionen und -geschwindigkeiten festgelegt. Jedes Teilchen beschreibt einen Zickzack-Weg auf den Freiflugbahnen.

Wir wollen die Freiflugbahnen, auf denen sich die Teilchen bewegen, als *Phononen* interpretieren, die wir mit dem Index β nummerieren. Zur Zeit $\bar{t} = 0$ definiert jedes Teilchen α genau ein Phonon β , welches sich für alle Zeiten auf der folgenden Freiflugbahn bewegt

$$t \mapsto x_\alpha(0) + t v_\alpha(0). \quad (4.3.13)$$

Wir können nun jedem Phonon β zu (fast) jeder Zeit eindeutig ein Teilchen $\alpha_\beta(t)$ zuordnen, das sich zu dieser Zeit auf der Freiflugbahn des Phonons β bewegt. Da wir in den Anfangsdaten die Nummerierung der Phononen beliebig wählen können, wollen wir $\alpha_\beta(0) = \beta$ vereinbaren.

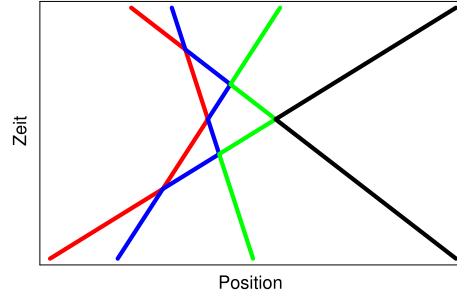


Abb. 4.1: Schematische Darstellung der mikroskopischen Dynamik im EULER-Bild für das Billard-Modell mit vier Teilchen. Jedes Teilchen ist durch eine andere Farbe gekennzeichnet und beschreibt eine Zickzack-Weg auf den Freiflugbahnen der Phononen. \diamond

Die atomaren Wechselwirkungen finden an den Schnittpunkten der Freiflugbahnen der Phononen statt und können wie folgt beschrieben werden: Seien β_1 und β_2 zwei Phononen, deren Freiflugbahnen sich zu einem Zeitpunkt t schneiden. Mit $t - 0$ bzw. $t + 0$ wollen wir jeweils einen Zeitpunkt unmittelbar *vor* bzw. *nach* der Kollision bezeichnen. Dann gilt

1. vor der Kollision entweder

$$\alpha_{\beta_1}(t - 0) = \alpha_{\beta_2}(t - 0) - 1 \quad \text{oder} \quad \alpha_{\beta_1}(t - 0) = \alpha_{\beta_2}(t - 0) + 1,$$

und zwar je nachdem, ob die Geschwindigkeit von β_2 größer oder kleiner als die Geschwindigkeit von β_1 ist,

2. nach der Kollision in jedem Fall

$$\alpha_{\beta_1}(t + 0) = \alpha_{\beta_2}(t - 0) \quad \text{und} \quad \alpha_{\beta_2}(t + 0) = \alpha_{\beta_1}(t - 0),$$

d.h. die atomare Wechselwirkung ist aus Sicht der beteiligten Phononen β_1 und β_2 nichts anderes als die Inkrementierung oder Dekrementierung der entsprechenden Zahlen α_{β_1} und α_{β_2} .

Die Beschreibung der mikroskopischen Dynamik mit Hilfe von Phononen besitzt den Vorteil, dass unmittelbar aus den Anfangsdaten abgelesen werden kann, wann und wo zwei Teilchen miteinander wechselwirken, denn für je zwei Phononen β_1 und β_2 können sofort die *Kollisionszeit* $t_{\text{koll}}(\beta_1, \beta_2)$ und der *Kollisionsort* $x_{\text{koll}}(\beta_1, \beta_2)$ berechnet werden. Es gilt

$$t_{\text{koll}}(\beta_1, \beta_2) = -\frac{x_{\beta_2}(0) - x_{\beta_1}(0)}{v_{\beta_2}(0) - v_{\beta_1}(0)}, \quad (4.3.14)$$

$$x_{\text{koll}}(\beta_1, \beta_2) = x_{\beta_i} + t_{\text{koll}}(\beta_1, \beta_2) v_{\beta_i}(0), \quad i = 1, 2. \quad (4.3.15)$$

Dabei kann die Kollisionszeit auch negativ werden oder die Werte $\pm\infty$ annehmen. Für zwei Phononen β_1 und β_2 können wir allerdings nicht so einfach angeben, welche zwei benachbarten *Teilchen* es sind, die zur Zeit $t_{\text{koll}}(\beta_1, \beta_2)$ am Ort $x_{\text{koll}}(\beta_1, \beta_2)$ miteinander kollidieren, d.h. wir kennen nicht die Werte von $\alpha_{\beta_i}(t_{\text{koll}}(\beta_1, \beta_2))$. Diese Information kann im diskreten System nur aus der vollständigen Lösung gewonnen werden.

4.3.2.2 Traveling-Waves im EULER-Bild

In Abschnitt 3.1.3 haben wir folgende Familie von Traveling-Velocity-Waves für das Billard-Modell angegeben:

$$\mathbb{V}(r, k; \varphi) = \begin{cases} -\frac{r}{k} & \text{falls } 0 \leq \varphi < k, \\ +\frac{r}{1-k} & \text{falls } k \leq \varphi < 1. \end{cases} \quad (4.3.16)$$

Beachte, dass $k \in (0, 1)$ gilt, und dass im Billard-Modell die Frequenz ω und die mittlere Geschwindigkeit v unabhängig von r und k gewählt werden können. Aus (4.3.16) kann mit (3.1.7) sofort die entsprechende Familie $\mathbb{R}(r, k; \cdot)$ abgelesen werden. Mit $k^* = \min\{k, 1-k\}$ ergibt sich

$$r + \mathbb{R}\left(r, k; \varphi + \frac{k}{2}\right) = \frac{r}{1-k^*} \mathbb{D}(k^*; \varphi), \quad (4.3.17)$$

$$\mathbb{D}(k^*; \varphi) = \begin{cases} \varphi & \text{für } 0 \leq \varphi \leq k^*, \\ k^* & \text{für } k^* \leq \varphi \leq 1-k^*, \\ 1-\varphi & \text{für } 1-k^* \leq \varphi \leq 1. \end{cases} \quad (4.3.18)$$

Wir wollen für beliebige Parameter (r, v, k, ω) die entsprechende Traveling-Wave im EULER-Bild beschreiben, siehe dazu auch Abbildung 4.2. Aus den Gleichungen (4.3.16)–(4.3.17) sowie (3.1.3) können wir folgende Aussagen ableiten:

1. In jeder Traveling-Wave-Lösung treten nur zwei Geschwindigkeiten v_1 und v_2 auf, wobei wir $v_1 > v_2$ annehmen können.
2. Die Phononen mit Geschwindigkeit v_i bewegen sich auf einer Schar paralleler Geraden, wobei zwei benachbarte Geraden einen festen räumlichen Abstand r_i besitzen.

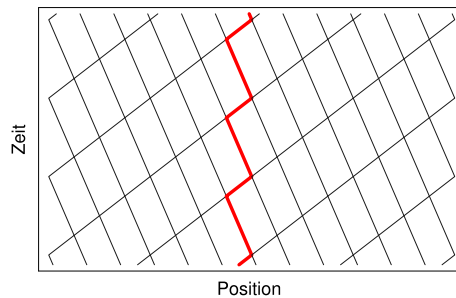


Abb. 4.2: Schematische Darstellung einer Traveling-Wave im mikroskopischen EULER-Bild mit periodischen Randbedingungen. Der rot gezeichnete Weg entspricht der Trajektorie eines ausgewählten Teilchens. \diamond

Es kann leicht gezeigt werden, dass die vier Größen v_1 , v_2 , r_1 und r_2 durch folgende Gleichungen bestimmt sind:

$$r_1 = \frac{r}{1-k}, \quad r_2 = \frac{r}{k}, \quad v_1 = v + r \frac{\omega}{1-k}, \quad v_2 = v - r \frac{\omega}{k}. \quad (4.3.19)$$

Außerdem setzen wir

$$\varrho_i := \frac{1}{r_i}, \quad \varrho := \varrho_1 + \varrho_2. \quad (4.3.20)$$

Die Größen ϱ_1, ϱ_2 können als partielle Phononendichten interpretiert werden; ihre Summe ergibt die Phononendichte, die gleich der Teilchendichte ist. Jede Traveling-Wave kann auch durch $(\varrho_1, v_1, \varrho_2, v_2)$ parametrisiert werden, denn mit (4.3.19) und (4.3.20) gilt auch

$$r = \frac{1}{\varrho_1 + \varrho_2}, \quad v = \frac{\varrho_1 v_1 + \varrho_2 v_2}{\varrho_1 + \varrho_2}, \quad k = \frac{\varrho_2}{\varrho_1 + \varrho_2}, \quad \omega = \frac{\varrho_1 \varrho_2 (v_1 - v_2)}{\varrho_1 + \varrho_2}. \quad (4.3.21)$$

Für spätere Zwecke wollen wir eine Alternative zu (4.3.17) angeben. Es gilt

$$r + \mathbb{R}\left(r, k; \varphi + \frac{k}{2}\right) = \mathbb{Z}_1(r_1, r_2, k; \varphi) + \mathbb{Z}_2(r_1, r_2, k; \varphi), \quad (4.3.22)$$

wobei

$$\begin{aligned} \mathbb{Z}_1(r_1, r_2, k; \varphi) &= \begin{cases} +r_1\varphi & \text{für } 0 \leq \varphi \leq 1-k, \\ -r_2(\varphi - 1 + k) & \text{für } 1-k \leq \varphi \leq 1, \end{cases} \\ \mathbb{Z}_2(r_1, r_2, k; \varphi) &= \begin{cases} +r_2\varphi & \text{für } 0 \leq \varphi \leq k, \\ -r_1(\varphi - k) & \text{für } k \leq \varphi \leq 1. \end{cases} \end{aligned}$$

Für alle Parameter (r_1, r_2, k) sind die Funktionen $\varphi \mapsto \mathbb{Z}_j(r_1, r_2, k; \varphi)$ beide 1-periodisch.

4.3.2.3 Beispiel für die mikroskopische Dynamik

Zur Illustration der mikroskopischen Dynamik präsentieren wir eine numerische Simulation. Für eine gegebene Teilchenzahl N und periodische Randbedingungen initialisieren wir die atomaren Positionen und Geschwindigkeiten wie folgt:

$$x_\alpha(0) = \alpha, \quad (4.3.23)$$

$$v_\alpha(0) = \begin{cases} v_1^0(\varepsilon\alpha) & \text{falls } \alpha \text{ gerade,} \\ v_2^0(\varepsilon\alpha) & \text{falls } \alpha \text{ ungerade.} \end{cases} \quad (4.3.24)$$

Hierbei gilt $\alpha = 1 \dots N$, sowie

$$v_1^0(\bar{\alpha}) = 1 + \frac{1}{5} \cos(4\pi\bar{\alpha}), \quad v_2^0(\bar{\alpha}) = -1 + \frac{3}{10} \sin(2\pi\bar{\alpha}). \quad (4.3.25)$$

In Abbildung 4.3 haben wir für $N = 64$ die exakte Lösung des diskreten Problems im makroskopischen EULER-Bild dargestellt. Wir können leicht die Familien der links- bzw. der rechtslaufenden Phononen definieren, wobei unsere makroskopische Darstellungszeit (konkret gilt $\bar{t}_{\text{end}} = 0.3$) so klein ist, dass sich die Freiflugbahnen von Phononen derselben Familie nicht schneiden. Für große Teilchenzahlen N können wir erwarten, dass die atomaren Daten lokal durch Traveling-Waves beschrieben werden können, wobei die Parameter dieser Traveling-Waves auf der makroskopischen Skala variieren. Dies gilt aber nur, weil die atomaren Geschwindigkeiten lokal zwischen zwei Werten springen. Es ist leicht,

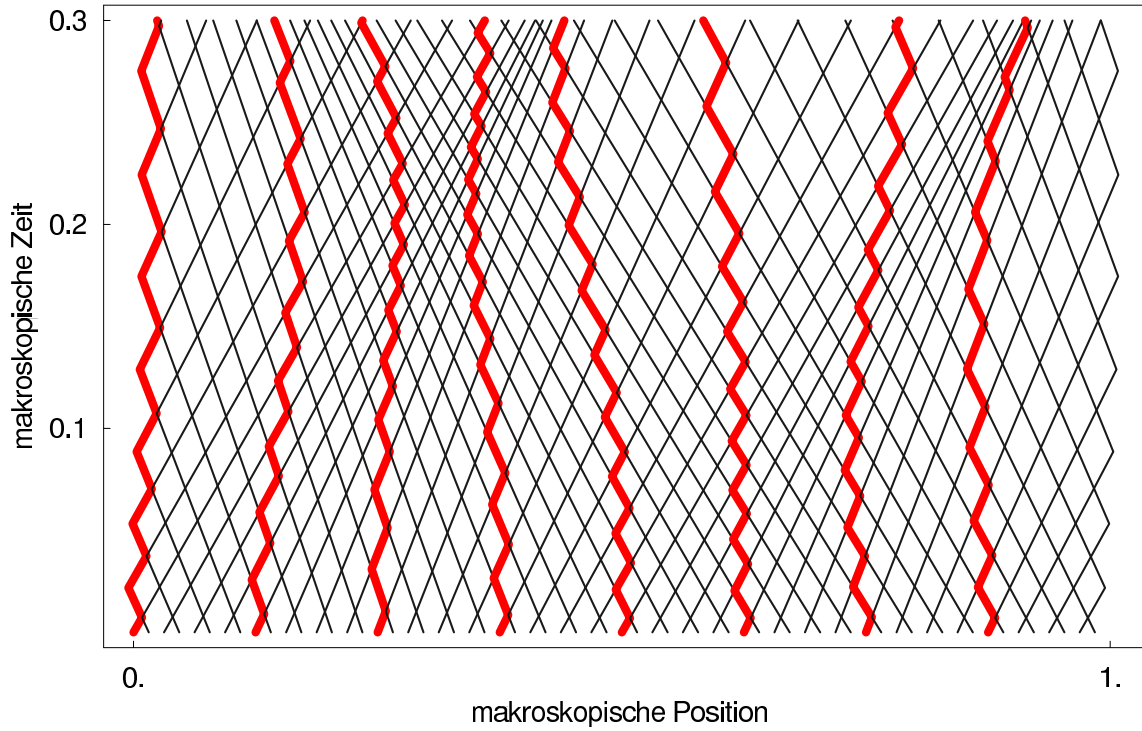


Abb. 4.3: Die mikroskopische Dynamik für $N = 64$ im makroskopischen EULER-Bild; die Trajektorien von acht ausgewählten Teilchen sind mit roter Farbe gezeichnet. \diamond

Anfangsdaten so zu konstruieren, dass die atomaren Geschwindigkeiten zwischen mehr als zwei Werten springen. In diesem Fall können wir dann nicht erwarten, dass der thermodynamische Limes durch modulierte Traveling-Waves beschrieben werden kann. Dasselbe gilt für unser Beispiel, wenn die makroskopische Zeit so groß wird, dass sich die Freiflugbahnen von Phononen derselben Familie schneiden.

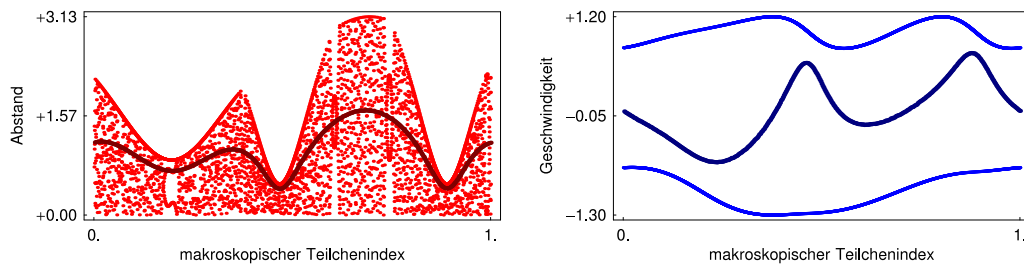


Abb. 4.4: Die atomaren Abstände und Geschwindigkeiten für $N = 4096$ und $\bar{t} = 0.3$ über dem makroskopischen Teilchenindex. Die dunkler gefärbten makroskopischen Funktionen entsprechen den lokalen Mittelwerten, deren Dynamik durch die Modulationsgleichungen beschrieben wird. \diamond

In Abbildung 4.4 haben wir die atomaren Daten für $\bar{t} = 0.3$ und $N = 4096$ über dem makroskopischen Teilchenindex aufgetragen, wobei die dunkler gefärbten Linien die lokalen Mittelwerte darstellen. Wir sehen sehr deutlich, dass es lokal nur zwei atomare Geschwindigkeiten im System gibt. Deshalb können wir erwarten, dass die Evolution der makroskopischen Mittelwerte durch die Modulationsgleichungen beschrieben werden.

4.3.2.4 Die Modulationsgleichungen im EULER-Bild

Nachdem wir gesehen haben, dass die mikroskopische Dynamik des Billard-Modells im EULER-Bild besonders einfach zu beschreiben ist, wollen wir auch die Modulationsgleichungen (4.3.26) in das EULER-Bild transformieren. Dabei folgen wir der üblichen Strategie der Thermodynamik, um von (4.3.26) sofort in das *makroskopische* EULER-Bild zu wechseln.

Um eine strikte Unterscheidung zwischen den unterschiedlichen makroskopischen Bildern zu besitzen, wollen wir alle Felder im LAGRANGE-Bild mit „ \sim “, und alle Felder im EULER-Bild mit „ $\hat{\sim}$ “ kennzeichnen. Die Modulationsgleichungen (4.2.26) schreiben wir daher als

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} \begin{pmatrix} \tilde{r} \\ \tilde{v} \\ \tilde{k} \\ \tilde{S} \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} \begin{pmatrix} -\tilde{v} \\ +\tilde{p} \\ -\tilde{\omega} \\ +\tilde{g} \end{pmatrix} = 0, \quad (4.3.26)$$

wobei $\tilde{S} = S(\tilde{r}, \tilde{k}, \tilde{\omega})$, $\tilde{p} = p(\tilde{r}, \tilde{k}, \tilde{\omega})$ und $\tilde{g} = g(\tilde{r}, \tilde{k}, \tilde{\omega})$. Hierbei gelten nach Abschnitt 3.1.3, Formel (3.1.38), die Identitäten

$$\begin{aligned} S(r, k, \omega) &= \frac{r^2 \omega}{k(1-k)}, \\ p(r, k, \omega) &= \frac{r \omega^2}{k(1-k)}, \\ g(r, k, \omega) &= \frac{r^2 \omega^2 (2k-1)}{2k^2(1-k)^2}. \end{aligned} \quad (4.3.27)$$

Da die Zustandsgleichungen sowohl im EULER- als auch im LAGRANGE-Bild gelten, schreiben wir innerhalb dieser algebraischen Gleichungen weder „ $\hat{\sim}$ “ noch „ \sim “.

Um die makroskopische EULER-Koordinate \bar{y} zu definieren, nehmen wir an, dass \tilde{r} strikt positiv ist und führen zunächst ein Feld $\tilde{\bar{y}}$ durch Integration der Massebilanz von (4.3.26) ein, d.h. es gilt

$$\frac{\partial \tilde{\bar{y}}}{\partial \bar{t}} = \tilde{v}, \quad \frac{\partial \tilde{\bar{y}}}{\partial \bar{\alpha}} = \tilde{r} = \frac{1}{\tilde{q}}. \quad (4.3.28)$$

Außerdem sei $\tilde{\bar{y}}(0, 0) = 0$ vereinbart. Für jedes \bar{t} ist die Zuordnung

$$\bar{\alpha} \rightarrow \tilde{\bar{y}}(\bar{t}, \bar{\alpha}) \quad (4.3.29)$$

invertierbar, so dass wir die Koordinate $\bar{\alpha}$ durch \bar{y} ersetzen können. Der Koordinatenwechsel

$$(\bar{t}, \bar{\alpha}) \rightarrow (\bar{t}, \bar{y}) \quad (4.3.30)$$

transformiert jedes Feld \tilde{u} und ein entsprechendes Feld \hat{u} , wobei gilt

$$\tilde{u}(\bar{t}, \bar{\alpha}) = \hat{u}\left(\bar{t}, \tilde{\bar{y}}(\bar{t}, \bar{\alpha})\right). \quad (4.3.31)$$

In den Koordinaten (\bar{t}, \bar{y}) besitzen die Modulationsgleichungen (4.3.26) die folgende Gestalt:

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} \begin{pmatrix} \hat{\varrho} \\ \hat{\varrho} \hat{v} \\ \hat{\varrho} \hat{k} \\ \hat{\varrho} \hat{S} \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial \bar{y}} \begin{pmatrix} \hat{\varrho} \hat{v} \\ \hat{\varrho} \hat{v}^2 + \hat{p} \\ \hat{\varrho} \hat{k} \hat{v} - \hat{\omega} \\ \hat{\varrho} \hat{S} \hat{v} + \hat{g} \end{pmatrix} = 0. \quad (4.3.32)$$

Die Felder $\hat{\varrho} \hat{v}$, $\hat{\varrho} \hat{k}$ bzw. $\hat{\varrho} \hat{S}$ sind die nicht-spezifischen, d.h. additiven, Dichten des Impulses, der Wellenzahl bzw. der Entropie.

Motiviert durch die letzten Abschnitte führen wir nun mit Hilfe der Definitionen (4.3.19)–(4.3.20) die Größen \hat{v}_1 , \hat{v}_2 , $\hat{\varrho}_1$ und $\hat{\varrho}_2$ ein, die jetzt natürlich Felder in den Variablen (\bar{t}, \bar{y}) sind. Es gilt

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} \begin{pmatrix} \hat{\varrho}_1 \\ \hat{v}_1 \\ \hat{\varrho}_2 \\ \hat{v}_2 \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial \bar{y}} \begin{pmatrix} \hat{\varrho}_1 \hat{v}_1 \\ \frac{1}{2} \hat{v}_1^2 \\ \hat{\varrho}_2 \hat{v}_2 \\ \frac{1}{2} \hat{v}_2^2 \end{pmatrix} = 0. \quad (4.3.33)$$

Des Weiteren gelten die folgenden Bemerkungen:

1. Die zu (4.3.28) inverse Transformation ist gegeben durch

$$\frac{\partial \hat{\alpha}}{\partial \bar{y}} = \hat{\varrho}, \quad \frac{\partial \hat{\alpha}}{\partial \bar{t}} = -\hat{\varrho} \hat{v}, \quad (4.3.34)$$

mit $\hat{\alpha}(0, 0) = 0$, wobei $\hat{\varrho} = 1/\hat{r}$ die Massendichte ist.

2. Die Systeme (4.3.26) und (4.3.32)/(4.3.33) sind äquivalent, solange die Lösungen glatt bleiben.
3. Wir werden weiter unten sehen, dass für jede glatte Lösung von (4.3.32) die Massendichte $\hat{\varrho}$ strikt positiv ist, sofern sie zur Zeit $\bar{t} = 0$ strikt positiv ist. Deshalb bleibt auch für jede glatte Lösung von (4.3.26) die spezifische Länge \tilde{r} strikt positiv, sofern sie in den Anfangsdaten strikt positiv ist.
4. Die Größe \bar{y} ist gerade die makroskopische EULER-Koordinate, die wir früher immer mit \bar{x} bezeichnet hatten. Wir haben die neue Bezeichnung eingeführt, um deutlich zu machen, dass hier \bar{y} nicht durch Skalierung von atomaren Positionen definiert ist, sondern durch Integration der makroskopischen Massebilanz entsteht.

Jede Lösung von (4.3.33) ist vollständig durch die Lösungen der beiden BURGERS-Gleichungen

$$\frac{\partial \hat{v}_j}{\partial \bar{t}} + \frac{1}{2} \frac{\partial (\hat{v}_j^2)}{\partial \bar{y}} = 0, \quad j = 1, 2, \quad (4.3.35)$$

bestimmt, welche für hinreichend kleine Zeiten \bar{t} wie folgt gegeben sind:

$$\widehat{v}_j(\bar{t}, \bar{y}) = \widehat{v}_j\left(0, \widehat{\xi}_j(\bar{t}, \bar{y})\right). \quad (4.3.36)$$

Hierbei ist $\widehat{\xi}_j(\bar{t}, \bar{y})$ die Anfangsposition derjenigen Charakteristik von (4.3.35), die zur Zeit \bar{t} durch \bar{y} läuft, d.h. es gilt

$$\widehat{\xi}_j(\bar{t}, \bar{y}) + \bar{t} \widehat{v}_j\left(0, \widehat{\xi}_j(\bar{t}, \bar{y})\right) = \bar{y}. \quad (4.3.37)$$

Wir formulieren nun wichtige Eigenschaften der Modulationsgleichungen. Dabei wollen wir immer davon ausgehen, dass die Größe \bar{y} die gesamte reelle Achse durchläuft.

Lemma 4.3.2 *Es gelten die folgenden Aussagen:*

1. Die Gleichung (4.3.37) kann für $j = 1, 2$ und für beliebiges \bar{y} gelöst werden, falls für \bar{t} gilt

$$1 + \bar{t} \min \left\{ \inf_{\bar{y}} \frac{\partial \widehat{v}_1}{\partial \bar{y}}(0, \bar{y}), \inf_{\bar{y}} \frac{\partial \widehat{v}_2}{\partial \bar{y}}(0, \bar{y}) \right\} > 0. \quad (4.3.38)$$

2. Für die Funktionen $\widehat{\xi}_1$ und $\widehat{\xi}_2$ gilt

$$\frac{\partial \widehat{\xi}_j}{\partial \bar{t}}(\bar{t}, \bar{y}) = \frac{-\widehat{v}_j\left(0, \widehat{\xi}_j(\bar{t}, \bar{y})\right)}{1 + \bar{t} \frac{\partial \widehat{v}_j}{\partial \bar{y}}\left(0, \widehat{\xi}_j(\bar{t}, \bar{y})\right)}, \quad (4.3.39)$$

$$\frac{\partial \widehat{\xi}_j}{\partial \bar{y}}(\bar{t}, \bar{y}) = \frac{1}{1 + \bar{t} \frac{\partial \widehat{v}_j}{\partial \bar{y}}\left(0, \widehat{\xi}_j(\bar{t}, \bar{y})\right)}. \quad (4.3.40)$$

3. Für alle nach (4.3.38) zulässigen Zeiten \bar{t} können die Lösungen von (4.3.33) wie folgt dargestellt werden:

$$\widehat{v}_j(\bar{t}, \bar{y}) = \widehat{v}_j\left(0, \widehat{\xi}_j(\bar{t}, \bar{y})\right), \quad (4.3.41)$$

$$\widehat{\varrho}_j(\bar{t}, \bar{y}) = \frac{\widehat{\varrho}_j\left(0, \widehat{\xi}_j(\bar{t}, \bar{y})\right)}{1 + \bar{t} \frac{\partial \widehat{v}_j}{\partial \bar{y}}\left(0, \widehat{\xi}_j(\bar{t}, \bar{y})\right)}. \quad (4.3.42)$$

4. Seien \widehat{B}_1 und \widehat{B}_2 die aufintegrierten partiellen Massebilanzen, d.h.

$$\frac{\partial \widehat{B}_j}{\partial \bar{t}}(\bar{t}, \bar{y}) = -(\widehat{\varrho}_j \widehat{v}_j)(\bar{t}, \bar{y}), \quad \frac{\partial \widehat{B}_j}{\partial \bar{y}}(\bar{t}, \bar{y}) = +\widehat{\varrho}_j(\bar{t}, \bar{y}), \quad (4.3.43)$$

mit $\widehat{B}_j(0, 0) = 0$, und sei $\widehat{A} = \widehat{B}_1 + \widehat{B}_2$. Dann gilt

$$\widehat{B}_j(\bar{t}, \bar{y}) = \widehat{B}_j\left(0, \widehat{\xi}_j(\bar{t}, \bar{y})\right). \quad (4.3.44)$$

Beweis:

1. Für Zeiten \bar{t} mit (4.3.38) ist die Funktion

$$\xi \mapsto \xi + \bar{t} \widehat{v}(0, \xi) \quad (4.3.45)$$

strikt monoton wachsend und daher auch invertierbar. Deshalb ist (4.3.37) dann eindeutig lösbar.

2. (4.3.39) und (4.3.40) folgen durch Differentiation der Gleichung (4.3.37).
 3. (4.3.41) ist gerade (4.3.36), und (4.3.42) folgt, wenn wir (4.3.41) in die partiellen Massebilanzen einsetzen.
 4. Aus (4.3.43) folgt mit (4.3.39)–(4.3.40) und (4.3.41)–(4.3.42) auch

$$\frac{\partial \widehat{B}_j}{\partial \bar{t}}(\bar{t}, \bar{y}) = \frac{\partial \widehat{\xi}_j}{\partial \bar{t}}(\bar{t}, \bar{y}) \widehat{\varrho}_j(0, \widehat{\xi}_j(\bar{t}, \bar{y})), \quad (4.3.46)$$

$$\frac{\partial \widehat{B}_j}{\partial \bar{y}}(\bar{t}, \bar{y}) = \frac{\partial \widehat{\xi}_j}{\partial \bar{y}}(\bar{t}, \bar{y}) \widehat{\varrho}_j(0, \widehat{\xi}_j(\bar{t}, \bar{y})). \quad (4.3.47)$$

Mit

$$\frac{\partial \widehat{B}_j}{\partial \bar{y}}(0, \bar{y}) = \widehat{\varrho}_j(0, \bar{y}) \quad (4.3.48)$$

ergibt sich (4.3.44). \square

Wir merken an, dass die Funktion \widehat{A} gerade die LAGRANGE-Koordinate $\bar{\alpha}$ ist, d.h. für alle $(\bar{t}, \bar{\alpha})$ gilt

$$\widehat{A}(\bar{t}, \widetilde{y}(\bar{t}, \bar{\alpha})) = \widehat{B}_1(\bar{t}, \widetilde{y}(\bar{t}, \bar{\alpha})) + \widehat{B}_2(\bar{t}, \widetilde{y}(\bar{t}, \bar{\alpha})) = \bar{\alpha}. \quad (4.3.49)$$

Es ist aber sinnvoll, die makroskopische Größe \widetilde{A} , die durch Integration der Massebilanz in (4.3.33) entsteht, zunächst von skalierten Teilchenzahlen deutlich zu unterscheiden.

4.3.2.5 Eine Klasse von makroskopischen Lösungen

Wir betrachten im Folgenden glatte Lösungen der Modulationsgleichungen (4.3.33), um dann im Abschnitt 4.3.2.6 ein Rechtfertigungsergebnis abzuleiten.

Annahme/Bezeichnungen 4.3.3 *Im weiteren Verlauf gelte:*

1. $\widehat{\varrho}_1, \widehat{\varrho}_2, \widehat{v}_1$ und \widehat{v}_1 seien eine C^2 -Lösung von (4.3.33) mit folgenden Eigenschaften:

- (i) Alle Felder sind periodisch im Ort mit Periode \bar{L} .
- (ii) Alle Felder sind für makroskopische Zeiten \bar{t} mit $0 \leq \bar{t} \leq \bar{t}_{\text{end}}$ definiert, wobei \bar{t}_{end} eine nach (4.3.38) zulässige Zeit ist.
- (iii) Die Felder $\widehat{\varrho}, \widehat{r}, \widehat{r}_j, \widehat{k}$ und $\widehat{\omega}$ seien durch (4.3.20)–(4.3.21) definiert, und \widehat{B}_j seien die aufintegrierten partiellen Massebilanzen wie in Lemma 4.3.2.

(iv) Es gibt eine Konstante $\delta > 0$, so dass alle folgenden Felder punktweise größer als 2δ sind:

$$\widehat{v}_1 - \widehat{v}_2, \widehat{\varrho}, \widehat{\varrho}_1, \widehat{\varrho}_2, \widehat{r}, \widehat{r}_1, \widehat{r}_2, \widehat{\omega}, \widehat{k}, 1 - \widehat{k}. \quad (4.3.50)$$

2. Jedes EULER-Feld \widehat{u} wird in ein entsprechendes LAGRANGE-Feld \widetilde{u} transformiert, wobei (4.3.31) gilt. Die Felder $\widetilde{r}, \widetilde{v}, \widetilde{k}$ und $\widetilde{\omega}$ sind dann eine glatte Lösung von (4.3.26), und (4.3.49) liest sich

$$\widetilde{B}_1(\bar{t}, \bar{\alpha}) + \widetilde{B}_2(\bar{t}, \bar{\alpha}) = \bar{\alpha}. \quad (4.3.51)$$

3. Durch die Gleichungen

$$\widehat{v}_j(0, \bar{y}) = W_j(\widehat{B}_j(0, \bar{y})), \quad j = 1, 2, \quad (4.3.52)$$

werden eindeutig zwei Funktionen W_1 und W_2 definiert.

4.3.2.6 Modulierte Traveling-Waves im EULER-Bild

Wir wollen nun die glatten Lösungen der Modulationsgleichungen in den Ansatz (4.3.5) einsetzen, wobei wir eine hinreichend große Teilchenzahl N wählen wollen. Die resultierenden Abstände bzw. Geschwindigkeiten wollen wir in diesem Abschnitt mit $r_\alpha^{\text{TW}}(t)$ bzw. mit $v_\alpha^{\text{TW}}(t)$ bezeichnen.

Unser Ziel ist es zu zeigen, dass $r_\alpha^{\text{TW}}(t)$ und $v_\alpha^{\text{TW}}(t)$ wirklich eine approximative Lösung des diskreten Problems definieren. Dazu werden wir die Differenz zu einer exakten Lösung genau abschätzen.

Lemma 4.3.4 *Es gilt*

$$v_\alpha^{\text{TW}}(t) = \mathbb{W}\left(\left(\widetilde{B}_1, \widetilde{B}_2, \widetilde{k}\right)(\varepsilon t, \varepsilon \alpha); \frac{1}{\varepsilon} \widetilde{B}_2(\varepsilon t, \varepsilon \bar{t})\right), \quad (4.3.53)$$

mit

$$\mathbb{W}(B_1, B_2, k; \varphi) = \begin{cases} W_2(B_2) & \text{falls } 0 \leq \varphi < k \pmod{1}, \\ W_1(B_1) & \text{falls } 1 - k \leq \varphi < 1 \pmod{1}. \end{cases}$$

Insbesondere ist \widetilde{B}_2 die Phase, d.h. es gilt

$$\widetilde{\omega}(\bar{t}, \bar{\alpha}) = \frac{\partial \widetilde{B}_2}{\partial \bar{t}}(\bar{t}, \bar{\alpha}), \quad (4.3.54)$$

$$\widetilde{k}(\bar{t}, \bar{\alpha}) = \frac{\partial \widetilde{B}_2}{\partial \bar{\alpha}}(\bar{t}, \bar{\alpha}). \quad (4.3.55)$$

Beweis: Zum Beweis dieses Lemmas transformieren wir den Ansatz (4.3.5) ins EULER-Bild, und benutzen dabei die glatte Lösung von (4.3.26). Zunächst wollen wir die Gleichung (4.3.54) überprüfen. Es gilt

$$\begin{aligned} \frac{\partial \widetilde{B}_2}{\partial \bar{t}}(\bar{t}, \bar{\alpha}) &= \frac{\partial \widehat{B}_2}{\partial \bar{t}}\left(\bar{t}, \widetilde{y}(\bar{t}, \bar{\alpha})\right) + \frac{\partial \widetilde{y}}{\partial \bar{t}}(\bar{t}, \bar{\alpha}) \frac{\partial \widehat{B}_2}{\partial \bar{y}}\left(\bar{t}, \widetilde{y}(\bar{t}, \bar{\alpha})\right) \\ &= -(\widehat{\varrho}_2 \widehat{v}_2)\left(\bar{t}, \widetilde{y}(\bar{t}, \bar{\alpha})\right) + \widetilde{v}(\bar{t}, \bar{\alpha}) \widehat{\varrho}_2\left(\bar{t}, \widetilde{y}(\bar{t}, \bar{\alpha})\right) \\ &= (\widetilde{\varrho}_2 \widetilde{v} - \widetilde{\varrho}_2 \widehat{v}_2)(\bar{t}, \bar{\alpha}). \end{aligned} \quad (4.3.56)$$

Mit (4.3.21) folgt (4.3.54). Analog kann dann (4.3.55) gezeigt werden. Wir definieren

$$\widehat{\mathbb{V}}(\bar{t}, \bar{y}; \varphi) = \mathbb{V}(\widehat{r}(\bar{t}, \bar{y}), \widehat{k}(\bar{t}, \bar{y}); \varphi),$$

wobei \mathbb{V} die Familie von Traveling-Velocity-Waves aus (4.3.16) ist. Mit dem Modulationsansatz (4.3.5) erhalten wir

$$\begin{aligned} v_{\alpha}^{\text{TW}}(t) &= \widetilde{v}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) + \mathbb{V}\left(\widetilde{r}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha), \widetilde{k}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha); \frac{1}{\varepsilon} \widetilde{B}_2(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right) \\ &= \widehat{v}\left(\varepsilon t, \widetilde{y}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right) + \widehat{\mathbb{V}}\left(\varepsilon t, \widetilde{y}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha); \frac{1}{\varepsilon} \widehat{B}_2\left(\varepsilon t, \widetilde{y}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right)\right). \end{aligned}$$

Mit (4.3.16) gilt dann

$$v_{\alpha}^{\text{TW}}(t) = \begin{cases} \widehat{v}_2\left(\varepsilon t, \widetilde{y}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right) & \text{falls (4.3.58) gilt,} \\ \widehat{v}_1\left(\varepsilon t, \widetilde{y}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right) & \text{falls (4.3.59) gilt,} \end{cases} \quad (4.3.57)$$

wobei die beiden Bedingungen sich wie folgt ergeben

$$0 \leq \widehat{B}_2\left(\varepsilon t, \widetilde{y}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right) < \varepsilon \widehat{k}\left(\varepsilon t, \widetilde{y}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right) \pmod{\varepsilon}, \quad (4.3.58)$$

$$\varepsilon \widehat{k}\left(\varepsilon t, \widetilde{y}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right) \leq \widehat{B}_2\left(\varepsilon t, \widetilde{y}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right) < 1 \pmod{\varepsilon}. \quad (4.3.59)$$

Die Formeln (4.3.41) und (4.3.44) aus Lemma 4.3.2 sowie die Definition von W_j liefern

$$\begin{aligned} \widehat{v}_j\left(\varepsilon t, \widetilde{y}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right) &= \widehat{v}_j\left(0, \widehat{\xi}_j\left(\varepsilon t, \widetilde{y}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right)\right) \\ &= W_j\left(\widehat{B}_j\left(0, \widehat{\xi}_j\left(\varepsilon t, \widetilde{y}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right)\right)\right) \\ &= W_j\left(\widehat{B}_j\left(\varepsilon t, \widetilde{y}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right)\right) \\ &= W_j\left(\widetilde{B}_j(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right). \end{aligned} \quad (4.3.60)$$

Wenn wir schließlich auch die Bedingungen (4.3.58) und (4.3.59) in LAGRANGE-Koordinaten schreiben, so erhalten wir (4.3.53). \square

Ebenso existiert eine Darstellung für die Abstände $r_{\alpha}^{\text{TW}}(t)$ in einer modulierten Traveling-Wave.

Bemerkung 4.3.5 *Es gilt*

$$\begin{aligned} r_{\alpha}^{\text{TW}}(t) &= \mathbb{Z}_1\left(\left(\widetilde{r}_1, \widetilde{r}_2, \widetilde{k}\right)(\varepsilon t, \varepsilon \alpha); \frac{1}{\varepsilon} \widetilde{B}_2(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right) + \\ &\quad \mathbb{Z}_2\left(\left(\widetilde{r}_1, \widetilde{r}_2, \widetilde{k}\right)(\varepsilon t, \varepsilon \alpha); \frac{1}{\varepsilon} \widetilde{B}_2(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right), \end{aligned}$$

wobei $\mathbb{Z}_j(r_1, r_2, k; \cdot)$ in (4.3.23) gegeben sind.

Beweis: Die Behauptungen folgen aus dem Beweis von Lemma 4.3.4. \square

Wir werden nun die Profilkfunktionen \mathbb{W} aus Lemma 4.3.4 benutzen, um exakte Lösungen des mikroskopischen System zu konstruieren. Dazu setzen wir

$$\tilde{k}^{\text{ex}}(\bar{t}, \bar{\alpha}) := \frac{1}{\varepsilon} \left(\tilde{B}_2(\bar{t}, \bar{\alpha}) - \tilde{B}_2(\bar{t}, \bar{\alpha} - \varepsilon) \right) \quad (4.3.61)$$

sowie

$$\tilde{B}_2^{\text{ex}}(\bar{t}, \bar{\alpha}) := \varepsilon \text{ floor} \left(\frac{1}{\varepsilon} \tilde{B}_2(\bar{t}, \bar{\alpha}) \right), \quad (4.3.62)$$

$$\tilde{B}_1^{\text{ex}}(\bar{t}, \bar{\alpha}) := \varepsilon \text{ ceil} \left(\frac{1}{\varepsilon} \tilde{B}_1(\bar{t}, \bar{\alpha}) + \tilde{k}^{\text{ex}}(\bar{t}, \bar{\alpha}) \right). \quad (4.3.63)$$

Hierbei meinen $\text{floor}(b)$ bzw. $\text{ceil}(b)$ jeweils einen ganzzahligen Anteil von b . Insbesondere gilt für alle reellen b , dass

$$0 \leq b - \text{floor}(b) < 1, \quad 0 \leq \text{ceil}(b) - b < 1. \quad (4.3.64)$$

Es folgt unmittelbar

$$\tilde{k}^{\text{ex}}(\bar{t}, \bar{\alpha}) = \tilde{k}(\bar{t}, \bar{\alpha}) + \mathcal{O}(\varepsilon), \quad (4.3.65)$$

$$\tilde{B}_j^{\text{ex}}(\bar{t}, \bar{\alpha}) = \tilde{B}_j(\bar{t}, \bar{\alpha}) + \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (4.3.66)$$

Im nächsten Schritt definieren wir für jedes ganzzahlige α und jedes t eine Geschwindigkeit $v_\alpha^{\text{ex}}(t)$ durch

$$v_\alpha^{\text{ex}}(t) := \mathbb{W} \left(\left(\tilde{B}_1^{\text{ex}}, \tilde{B}_2^{\text{ex}}, \tilde{k}^{\text{ex}} \right)(\varepsilon t, \varepsilon \alpha); \frac{1}{\varepsilon} \tilde{B}_2(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) \right). \quad (4.3.67)$$

Beachte, dass wir in der Phasenvariable den Term \tilde{B}_2 nicht durch \tilde{B}_2^{ex} ersetzt haben. Wir werden im Folgenden zeigen, dass Definition (4.3.67) eindeutig eine Lösung des diskreten Systems festlegt. Dabei werden die folgenden Abkürzungen hilfreich sein

$$b_{j,\alpha}^{\text{ex}}(t) := \frac{1}{\varepsilon} \tilde{B}_j^{\text{ex}}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha), \quad j = 1, 2, \quad (4.3.68)$$

die später als zwei Arten von Phononindizes interpretiert werden können.

Lemma 4.3.6 *Für alle ganzzahligen α ist die Funktion $t \mapsto v_\alpha^{\text{ex}}(t)$ stückweise konstant. Springt der Wert von v_α^{ex} zum Zeitpunkt t_0 , so tritt genau einer der beiden folgenden Fälle ein:*

1. Im ersten Fall gilt:

- (i) Der Wert von $b_{2,\alpha}^{\text{ex}}$ wird zur Zeit t_0 inkrementiert.
- (ii) Der Wert von $b_{1,\alpha}^{\text{ex}}$ bleibt konstant.
- (iii) v_α^{ex} springt von $W_1(\varepsilon b_{1,\alpha}^{\text{ex}}(t_0))$ auf $W_2(\varepsilon b_{2,\alpha}^{\text{ex}}(t_0 + 0))$.

2. Im zweiten Fall gilt:

- (i) Der Wert von $b_{1,\alpha}^{\text{ex}}$ wird zur Zeit t_0 dekrementiert.
- (ii) Der Wert von $b_{2,\alpha}^{\text{ex}}$ bleibt konstant.
- (iii) v_α^{ex} springt von $W_2(\varepsilon b_{2,\alpha}^{\text{ex}}(t_0))$ auf $W_1(\varepsilon b_{1,\alpha}^{\text{ex}}(t_0 + 0))$.

Darüber hinaus gilt: Der erste Fall tritt für ein Teilchen α genau dann ein, wenn der zweite Fall für $\alpha + 1$ eintritt. Ist t_0 eine Zeit, so dass zu dieser Zeit für ein Teilchen α der erste Fall eintritt, so gilt:

1. $b_{2,\alpha+1}^{\text{ex}}(t_0 + 0) = b_{2,\alpha+1}^{\text{ex}}(t_0 - 0) = b_{2,\alpha}^{\text{ex}}(t_0 + 0) = b_{2,\alpha}^{\text{ex}}(t_0 - 0) + 1,$
2. $b_{1,\alpha}^{\text{ex}}(t_0 + 0) = b_{1,\alpha}^{\text{ex}}(t_0 - 0) = b_{1,\alpha+1}^{\text{ex}}(t_0 + 0) = b_{1,\alpha+1}^{\text{ex}}(t_0 - 0) - 1,$
3. $v_\alpha^{\text{ex}}(t_0 + 0) = v_{\alpha+1}^{\text{ex}}(t_0 - 0), \quad v_{\alpha+1}^{\text{ex}}(t_0 + 0) = v_\alpha^{\text{ex}}(t_0 - 0).$

Beweis: Auf Grund von (4.3.51) und (4.3.54) wissen wir, dass für jedes α die Werte von $b_{1,\alpha}$ bzw. $b_{2,\alpha}$ mit zunehmender Zeit nur fallen bzw. wachsen können. Außerdem ist mit (4.3.62) und (4.3.63) sichergestellt, dass beide Größen nur ganzzahlige Werte annehmen können. Aus der Definition (4.3.61) schließen wir, dass

$$\tilde{B}_2(\varepsilon t, \varepsilon \alpha + \varepsilon) = \varepsilon \tilde{k}_2^{\text{ex}}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha + \varepsilon) \mod \varepsilon \quad (4.3.69)$$

genau dann gilt, wenn

$$\tilde{B}_2(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) = 0 \mod \varepsilon. \quad (4.3.70)$$

Insbesondere tritt für $\alpha + 1$ genau dann der zweite Fall ein, wenn für α der erste Fall eintritt. Alle weiteren Behauptungen folgen unmittelbar aus den Definitionen (4.3.61)–(4.3.68) sowie Lemma 4.3.4. \square

Das folgende Theorem zeigt, dass die Eigenschaften von $v_\alpha^{\text{ex}}(t)$ und $b_{j,\alpha}^{\text{ex}}(t)$ als Integrierbarkeitsbedingungen interpretiert werden können.

Theorem 4.3.7 *Zu jedem α gibt es genau eine Funktion $r_\alpha^{\text{ex}}(t)$ mit*

$$\frac{d}{dt} r_\alpha^{\text{ex}}(t) := v_{\alpha+1}^{\text{ex}}(t) - v_\alpha^{\text{ex}}(t), \quad (4.3.71)$$

so dass die Abstände $r_\alpha^{\text{ex}}(t)$ und die Geschwindigkeiten $v_\alpha^{\text{ex}}(t)$ eine Lösung des diskreten Problems sind.

Beweis: Wir definieren Funktionen $a_\beta(t)$, β ganzzahlig, durch das folgende dynamische Gesetz:

1. Es sei $a_\beta(0) = \beta$.
2. Wir setzen $a_\beta(t) = \alpha$, wenn entweder

- (i) $\beta = b_{2,\alpha}^{\text{ex}}(t)$ und $v_\alpha^{\text{ex}}(t) = W_2(\varepsilon \beta)$ gilt, oder

(ii) $\beta = b_{1,\alpha}^{\text{ex}}(t)$ und $v_\alpha^{\text{ex}}(t) = W_1(\varepsilon\beta)$ gilt.

Diese Definition ist durch die Phononen, vgl. Abschnitt 4.3.2.1, motiviert, denn wenn β wieder der Phononenindex ist, so ist $a_\beta(t)$ die Nummer des Teilchens, das sich auf der Bahn des Phonons β bewegt. Wir wollen zunächst zeigen, dass für jedes β die Funktion $t \mapsto a_\beta(t)$ wohldefiniert ist. Sei β fest, und seien t_0 und α so, dass $\alpha = a_\beta(t_0)$. Nehmen wir außerdem die erste Möglichkeit an, d.h. $v_\alpha^{\text{ex}}(t_0) = W_1(\varepsilon\beta)$. Mit t_1 wollen wir die kleinste Zeit bezeichnen, die größer als t_0 ist, und zu der $v_\alpha^{\text{ex}}(t)$ springt. Dann gilt nach Konstruktion und nach Lemma 4.3.6, dass

$$\beta = b_{1,\alpha}^{\text{ex}}(t_1 - 0) = b_{1,\alpha+1}^{\text{ex}}(t_1 + 0), \quad (4.3.72)$$

aber auch

$$W_1(\varepsilon\beta) = v_\alpha^{\text{ex}}(t_0 - 0) = v_{\alpha+1}^{\text{ex}}(t_0 + 0). \quad (4.3.73)$$

Es gilt also

$$a_\beta(t_1 - 0) = \alpha \quad \text{und} \quad a_\beta(t_1 + 0) = \alpha + 1. \quad (4.3.74)$$

Ebenso einfach kann der Fall $v_\alpha^{\text{ex}}(t_0) = W_2(\varepsilon\beta)$ behandelt werden. Insgesamt haben wir damit gezeigt, dass die Funktion $t \mapsto a_\beta(t)$ stückweise konstant ist. Nach Konstruktion gilt außerdem, dass $t \mapsto v_{a_\beta(t)}^{\text{ex}}(t)$ für jedes β konstant ist, wobei der Wert der Konstanten entweder durch $W_1(\varepsilon\beta)$ oder durch $W_2(\varepsilon\beta)$ gegeben ist. Wir unterscheiden daher zwei disjunkte Familien \mathcal{F}_1 und \mathcal{F}_2 von Phononen, wobei

$$\mathcal{F}_j := \left\{ \beta : v_{a_\beta(t)}^{\text{ex}}(t) = W_j(\varepsilon\beta) \right\}. \quad (4.3.75)$$

Im letzten Beweisschritt können wir eine Lösung des diskreten Problems vollständig reproduzieren. Dazu geben wir die Freiflugbahn eines beliebigen Phonons β_0 aus der Familie \mathcal{F}_2 vor. Zur Zeit $t = 0$ bewegt sich das Teilchen $\alpha_0 = a_{\beta_0}(0)$ auf der Freiflugbahn von β_0 . Seien t_1 und t_2 die beiden nächsten Sprungzeiten von $t \mapsto v_{\alpha_0}^{\text{ex}}(t)$, und sei $\beta_1 = b_{2,\alpha_0}^{\text{ex}}(t_2 +)$. Wir können nun leicht die Freiflugbahn von β_1 berechnen. Da β_1 der rechtsseitige Nachbar von β_0 in der Familie \mathcal{F}_1 ist, können induktiv die Freiflugbahnen aller Phononen $\beta \in \mathcal{F}_2$ mit $\beta > \beta_0$ berechnet werden. Mit ähnlich elementaren Argumenten können die Freiflugbahnen aller Phononen rekonstruiert werden. Schließlich ergibt sich für jedes α eine Funktion $x_\alpha^{\text{ex}}(t)$ mit $\dot{x}_\alpha^{\text{ex}}(t) = v_\alpha^{\text{ex}}(t)$. Mit

$$r_\alpha^{\text{ex}}(t) := x_{\alpha+1}^{\text{ex}}(t) - x_\alpha^{\text{ex}}(t) \quad (4.3.76)$$

folgt die Behauptung. □

Die von uns konstruierte exakte Lösung des diskreten Problems entspricht in ihrem qualitativen Verhalten dem Beispiel aus Abschnitt 4.3.2.3, da auch hier die atomaren Geschwindigkeiten zwischen zwei makroskopisch modulierten Geschwindigkeiten hin- und herspringen.

Lemma 4.3.8 *Für jedes beliebige α gelten die folgenden Aussagen:*

1. Die Abstände r_α^{TW} und r_α^{ex} sind in Phase, d.h. für alle Zeiten t gilt $r_\alpha^{\text{TW}}(t) = 0$ genau dann, wenn $r_\alpha^{\text{ex}}(t) = 0$.
2. Seien t_{beg} und t_{end} zwei Zeiten, so dass

$$\tilde{B}_2(\varepsilon t_{\text{end}}, \varepsilon \alpha) - \tilde{B}_2(\varepsilon t_{\text{beg}}, \varepsilon \alpha) = \varepsilon, \quad \tilde{B}_2(\varepsilon t_{\text{beg}}, \varepsilon \alpha) = 0 \pmod{\varepsilon}.$$

Dann gilt

$$t_{\text{end}} > t_{\text{beg}}, \quad t_{\text{end}} - t_{\text{beg}} = \mathcal{O}(1), \quad (4.3.77)$$

und es existieren Zeiten $t_1^{\text{TW}}, t_1^{\text{ex}}, t_2^{\text{TW}}, t_2^{\text{ex}}$ im Intervall $[t_{\text{beg}}, t_{\text{end}}]$ so dass

$$\tilde{B}_2(\varepsilon t_1^{\text{TW}}, \varepsilon \alpha) = +\varepsilon \tilde{k}(\varepsilon t_1^{\text{TW}}, \varepsilon \alpha) \pmod{\varepsilon}, \quad (4.3.78)$$

$$\tilde{B}_2(\varepsilon t_2^{\text{TW}}, \varepsilon \alpha) = -\varepsilon \tilde{k}(\varepsilon t_2^{\text{TW}}, \varepsilon \alpha) \pmod{\varepsilon}, \quad (4.3.79)$$

$$\tilde{B}_2(\varepsilon t_1^{\text{ex}}, \varepsilon \alpha) = +\varepsilon \tilde{k}^{\text{ex}}(\varepsilon t_1^{\text{ex}}, \varepsilon \alpha) \pmod{\varepsilon}, \quad (4.3.80)$$

$$\tilde{B}_2(\varepsilon t_2^{\text{ex}}, \varepsilon \alpha) = -\varepsilon \tilde{k}^{\text{ex}}(\varepsilon t_2^{\text{ex}}, \varepsilon \alpha) \pmod{\varepsilon}, \quad (4.3.81)$$

Außerdem gilt

$$t_1^{\text{TW}} - t_1^{\text{ex}} = \mathcal{O}(\varepsilon), \quad t_2^{\text{TW}} - t_2^{\text{ex}} = \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (4.3.82)$$

3. In jedem Zeitintervall $[t_{\text{beg}}, t_{\text{end}}]$ mit den obigen Eigenschaften gilt

$$r^{\text{TW}}(t) - r^{\text{ex}}(t) = \mathcal{O}(\varepsilon) \quad \forall t \in [t_{\text{beg}}, t_{\text{end}}]. \quad (4.3.83)$$

Beweis:

1. Sei t eine Zeit, so dass $r_\alpha^{\text{ex}}(t) = 0$. Theorem 4.3.7 liefert, dass zu dieser Zeit t sowohl $v_\alpha^{\text{ex}}(t)$ als auch $v_{\alpha+1}^{\text{ex}}(t)$ unstetig sind. Nach Lemma 4.3.6 gilt dann

$$\tilde{B}_2(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) = 0 \pmod{\varepsilon}. \quad (4.3.84)$$

Dies ist aber gerade die Bedingung für $r_\alpha^{\text{TW}}(t) = 0$. Da wir diese Argumentation auch umkehren können, sind r_α^{ex} und r_α^{TW} in der Tat in Phase.

2. Da $\tilde{B}_2(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)$ für jedes α strikt monoton wachsend ist, folgt (4.3.77). Weil außerdem gilt

$$0 < \delta \leq \tilde{k}, \quad \tilde{k}^{\text{ex}} \leq 1 - \delta < 1, \quad (4.3.85)$$

ist die Existenz der Zeiten $t_1^{\text{TW}}, t_1^{\text{ex}}, t_2^{\text{TW}}, t_2^{\text{ex}}$ gesichert. (4.3.65) impliziert schließlich auch (4.3.82).

3. Seien t_{beg} und t_{end} wie oben, sei $t_{\text{beg}} \leq t \leq t_{\text{end}}$ und sei

$$z_j(t) = \mathbb{Z}_j \left((\tilde{r}_1, \tilde{r}_2, \tilde{k})(\varepsilon t, \varepsilon \alpha); \frac{1}{\varepsilon} \tilde{B}_2(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) \right), \quad j = 1, 2,$$

wobei $\mathbb{Z}_j(r_1, r_2, k; \cdot)$ in (4.3.23) gegeben sind. Beachte, dass $z_j(t)$ stückweise glatt ist.

Mit (4.3.23) und (4.3.19) gilt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} z_1(t) &= \mathcal{O}(\varepsilon) + \begin{cases} (+\tilde{r}_1 \tilde{\omega})(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) & \text{falls } t_{\text{beg}} < t < t_1^{\text{TW}}, \\ (-\tilde{r}_2 \tilde{\omega})(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) & \text{falls } t_1^{\text{TW}} < t < t_{\text{end}}, \end{cases} \\ &= \mathcal{O}(\varepsilon) + \begin{cases} (\tilde{v}_1 - \tilde{v})(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) & \text{falls } t_{\text{beg}} < t < t_1^{\text{TW}}, \\ (\tilde{v}_2 - \tilde{v})(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) & \text{falls } t_1^{\text{TW}} < t < t_{\text{end}}. \end{cases} \end{aligned}$$

Es folgt

$$\frac{d}{dt} z_1(t) = v_{\alpha+1}^{\text{ex}}(t) - \tilde{v}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) + \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (4.3.86)$$

Analog kann gezeigt werden, dass

$$\frac{d}{dt} z_2(t) = -v_{\alpha}^{\text{ex}}(t) + \tilde{v}(\varepsilon t, \varepsilon \alpha) + \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (4.3.87)$$

Mit Bemerkung 4.3.5 ergibt sich schließlich

$$\frac{d}{dt} r_{\alpha}^{\text{TW}}(t) = \frac{d}{dt} r_{\alpha}^{\text{ex}}(t) + \mathcal{O}(\varepsilon), \quad (4.3.88)$$

und nach Integration auch (4.3.83). \square

Theorem 4.3.9 *Es seien $P^N(t)$ bzw. $Q^N(t)$ die zeitabhängigen Vektoren mit den Komponenten*

$$P_{\alpha}^N(t) := (r_{\alpha}^{\text{ex}}(t), v_{\alpha}^{\text{ex}}(t)), \quad (4.3.89)$$

$$Q_{\alpha}^N(t) := (r_{\alpha}^{\text{TW}}(t), v_{\alpha}^{\text{TW}}(t)). \quad (4.3.90)$$

wobei $\alpha = 1, \dots, N$. Dann existiert eine Konstante C , so dass

$$\|Q^N(t) - P^N(t)\|_{Y_N^2} \leq \frac{C}{N} \quad (4.3.91)$$

für alle mikroskopischen Zeiten $t \leq N\bar{t}_{\text{end}}$.

Beweis: Aus Lemma 4.3.8 schließen wir

$$r^{\text{TW}}(t) - r^{\text{ex}}(t) = \mathcal{O}(\varepsilon),$$

und damit

$$\|\Pi_r Q^N(t) - \Pi_r P^N(t)\|_{Y_N^2} = \mathcal{O}(\varepsilon),$$

wobei Π_r der Projektor auf die Abstände ist. Da die Profilkfunktionen

$$\mathbb{W}(B_1, B_2, k; \cdot) \in L^2([0, 1])$$

als $L^2([0, 1])$ -Funktionen stetig von ihren Parametern abhängen, gilt

$$\|\mathbb{U}(\bar{t}, \bar{\alpha}; \cdot)\|_{L^2([0, 1])} = \mathcal{O}(\varepsilon),$$

wobei

$$\mathbb{U}(\bar{t}, \bar{\alpha}; \cdot) = \mathbb{W}\left(\left(\tilde{B}_1, \tilde{B}_2, \tilde{k}\right)(\bar{t}, \bar{\alpha}); \cdot\right) - \mathbb{W}\left(\left(\tilde{B}_1^{\text{ex}}, \tilde{B}_2^{\text{ex}}, \tilde{k}^{\text{ex}}\right)(\bar{t}, \bar{\alpha}); \cdot\right).$$

Für die Geschwindigkeiten ergibt sich damit

$$\begin{aligned} \|\Pi_v Q^N(t) - \Pi_v P^N(t)\|_{Y_N^2}^2 &\leq \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \left| \mathbb{U}\left(\varepsilon t, \varepsilon \alpha; \frac{1}{\varepsilon} \tilde{B}_2(\varepsilon t, \varepsilon \alpha)\right) \right|^2 \\ &= \mathcal{O}(\varepsilon). \end{aligned}$$

Es folgt die Behauptung. □

Damit haben wir für das Billard-Modell der atomaren Kette die Modulationsgleichungen im Sinne von Abschnitt 4.3.1 gerechtfertigt.

5. Numerische Simulationen der atomaren Kette

5.1 Vorbemerkungen

Numerische Simulationen haben eine große Tradition in der Untersuchung diskreter Systeme mit vielen Freiheitsgraden. Das liegt zum einen daran, dass viele Probleme sich einer rigorosen Untersuchung entziehen, zum anderen aber auch daran, dass viele interessante Phänomene erstmals numerisch beobachtet wurden. Für die atomare Kette seien hier nun zwei Beispiele genannt: Zum einen die numerische Untersuchung der atomaren Kette mit schwacher Nichtlinearität durch FERMI, PASTA und ULAM ([FPU55]) im Jahre 1955, die wir bereits in der Einleitung vorgestellt haben. Ein weiteres Beispiel, das viele andere, auch analytische, Arbeiten nach sich gezogen hat, sind die numerischen Experimente von HOLIAN und STRAUB, [HS78], zur Ausbreitung von Stoßwellen. Eine sehr gute und lesbare Übersicht über die Ergebnisse von HOLIAN und STRAUB, sowie der in Folge entstandenen Arbeiten, geben FILIP und VENAKIDES in [FV99].

Auch wir wollen in diesem Kapitel einige numerische Experimente studieren, wobei wir uns vor allem darauf konzentrieren, die mikroskopischen Oszillationen, die für große Teilchenzahlen aus speziellen Anfangsdaten entstehen, zu charakterisieren. Wir werden sehen, dass diese mikroskopischen Oszillationen in vielen Fällen durch modulierte Traveling-Waves beschrieben werden können.

In Kapitel 5.2 beginnen wir mit der Darstellung des verwendeten numerischen Integrators und der mikroskopischen Anfangsdaten. Außerdem beschreiben wir, welche Strategie und Verfahren wir benutzen, um die große Menge mikroskopischer Daten auszuwerten.

Anschließend werden wir für zwei Klassen von Anfangswertproblemen jeweils mehrere numerische Simulationen diskutieren:

1. Die Klasse G in Unterkapitel 5.3: Glatte Anfangsdaten.
2. Die Klasse R in Unterkapitel 5.4: RIEMANN-Anfangsdaten.

In fast allen numerischen Simulationen haben wir das TODA-Potential (2.1.7) als Wechselwirkungspotential verwendet. Wir erwähnen aber, dass auch andere nichtlineare (aber konvexe) Potentiale zu qualitativ gleichen Resultaten führen, siehe auch Beispiel $G2$.

Insbesondere deuten alle numerischen Simulationen darauf hin, dass die vollständige Integrabilität des TODA-Potentials *keinen* Einfluss auf den thermodynamischen Limes hat, zumindest wenn wir die hyperbolische Skalierung und unsere Klasse von Anfangsdaten betrachten.

Wir wollen noch einmal daran erinnern, dass wir in dieser Arbeit ausschließlich die angelsächsische Notation für Dezimalzahlen verwenden, und dass wir alle numerisch berechneten Zahlen geeignet gerundet haben.

Abschließend wollen wir noch eine generelle Bemerkung zur Interpretation numerischer Ergebnisse machen: Die Mathematik ist deshalb die strengste aller Wissenschaften, weil sie nur das als Wahrheit akzeptiert, was durch einen rigorosen Beweis aus genau formulierten Voraussetzungen abgeleitet werden kann. Deshalb können numerische Simulationen bestenfalls Indizien für die Richtigkeit einer mathematischen Aussage liefern; sie können jedoch niemals als eine Art alternativer Beweis angesehen werden.

Es gibt jedoch viele Probleme, bei denen numerische Simulationen helfen können, zunächst einmal ein prinzipielles Verständnis des zu Grunde liegenden Problems zu entwickeln. Der Autor glaubt, dass die in diesem Kapitel vorgestellten numerischen Simulationen in der Tat zu einem qualitativen Verständnis des thermodynamischen Limes (bei hyperbolischer Skalierung) führen können.

Aus diesem Grund, und um den Text lesbar zu halten, werden wir unsere Interpretation der numerischen Ergebnisse in Form von Tatsachenbehauptungen formulieren. Die methodischen Einwände gegen die Interpretierbarkeit numerischer Simulationen bleiben davon natürlich unberührt.

5.2 Numerische Verfahren und ihre Implementierung

5.2.1 Der numerische Integrator

Zur numerischen Integration der NEWTONschen Bewegungsgleichung (2.1.3) verwenden wir das VERLET-Verfahren, das sich auf Grund seiner guten Eigenschaften bei molekulardynamischen Simulationen bewährt hat. Das VERLET-Verfahren ist ein Einschrittverfahren, das wie folgt formuliert werden kann:

$$x_{\alpha}^{(i+1)} = x_{\alpha}^{(i)} + h v_{\alpha}^{(i)} + \frac{h^2}{2} p_{\alpha}^{(i)}, \quad (5.2.1)$$

$$v_{\alpha}^{(i+1)} = v_{\alpha}^{(i)} + \frac{h}{2} (p_{\alpha}^{(i+1)} + p_{\alpha}^{(i)}), \quad (5.2.2)$$

$$p_{\alpha}^{(i)} = \Phi' \left(x_{\alpha+1}^{(i)} - x_{\alpha}^{(i)} \right) - \Phi' \left(x_{\alpha}^{(i)} - x_{\alpha-1}^{(i)} \right). \quad (5.2.3)$$

Hierbei ist $h = \Delta t$ die mikroskopische Zeitschrittweite, und der obere Index (i) bezeichnet die Werte der atomaren Daten im i -ten Zeitschritt. Beachte, dass für gegebene Teilchenzahl N die Teilchenindex α die ganzzahligen Werte $1 \dots N$ durchläuft.

Für Anfangswertprobleme der Klasse G bzw. der Klasse R wählen wir die Randbedingungen **PR** bzw. β -**KF** aus Abschnitt 2.1.3, wobei wir für letztere $\beta = 2$ setzen (vgl. dazu den nächsten Abschnitt). Für die Klasse G bedeutet das konkret

$$x_0^{(i)} = x_N^{(i)} - L \quad \text{und} \quad x_{N+1}^{(i)} = x_1^{(i)} + L, \quad (5.2.4)$$

wobei der Wert der Gesamtlänge L durch die Anfangsdaten bestimmt ist. Für die Klasse R hingegen ergibt sich

$$x_0^{(i)} = x_1^{(i)} + x_2^{(i)} - x_3^{(i)} \quad \text{und} \quad x_{N+1}^{(i)} = x_N^{(i)} + x_{N-1}^{(i)} - x_{N-2}^{(i)}. \quad (5.2.5)$$

Wir merken an, dass die Randbedingungen (5.2.5) nur für hinreichend kleine makroskopische Zeiten \bar{t} und für hinreichend große Teilchenzahlen N zu interpretierbaren Ergebnissen führt (siehe dazu Unterkapitel 5.4).

Die numerischen Eigenschaften des VERLET-Verfahrens werden in [HLW02] und [SYS97] ausführlich beschrieben. Insbesondere ist das VERLET-Verfahren symplektisch und von zweiter Ordnung.

Alle im Folgenden präsentierten numerischen Simulationen basieren auf einer Implementierung von (5.2.1) in FORTRAN 90, wobei immer eine konstante, aber hinreichend kleine, mikroskopische Schrittweite Δt verwendet wurde.

5.2.2 Anfangsdaten und Zeitschritte

Prinzipiell sind viele verschiedene Arten von mikroskopischen Anfangsdaten denkbar. In Abschnitt 2.2.1 haben wir bereits diskutiert, dass wir aber nur solche Anfangsdaten betrachten können, die zur gewählten Skalierung „passen“. Insbesondere sollten die Anfangsdaten für $N \rightarrow \infty$ gegen einen wohldefinierten Grenzwert streben. Da wir in den vorangegangenen Kapiteln einen Mikro-Makro-Übergang mit Temperatur im Kontext von modulierten Traveling-Waves beschrieben haben, werden wir im Folgenden nur solche Anfangsdaten betrachten, die mit dem Ansatz (4.1.1) bzw. (4.1.2)–(4.1.3) verträglich sind, d.h. die atomaren Daten zur Zeit $t = 0$ sind bereits durch modulierte Traveling-Waves gegeben.

Modulierte *binäre Oszillationen* sind modulierte Traveling-Waves, für die die Wellenzahl k nicht moduliert wird, sondern konstant mit Wert $1/2$ ist. Modulierte binäre Oszillationen sind besonders geeignet, um Anfangsdaten mit Temperatur zu erzeugen, da hier die genaue Kenntnis der Profilkfunktionen der modulierten Traveling-Waves nicht erforderlich ist.

Um Anfangsdaten in Form modulierter binärer Oszillation zu erzeugen, wählen wir vier makroskopische Funktionen r^{ung} , r^{ger} sowie v^{ung} , v^{ger} , welche nur vom makroskopischen Teilchenindex $\bar{\alpha}$ abhängen, und initialisieren die atomaren Abstände und Geschwindigkeiten

wie folgt:

$$\begin{aligned} r_\alpha(0) &= \begin{cases} r_{\text{ini}}^{\text{ung}}(\varepsilon\alpha) & \text{falls } \alpha \text{ ungerade,} \\ r_{\text{ini}}^{\text{ger}}(\varepsilon\alpha) & \text{falls } \alpha \text{ gerade,} \end{cases} \\ v_\alpha(0) &= \begin{cases} v_{\text{ini}}^{\text{ung}}(\varepsilon\alpha) & \text{falls } \alpha \text{ ungerade,} \\ v_{\text{ini}}^{\text{ger}}(\varepsilon\alpha) & \text{falls } \alpha \text{ gerade.} \end{cases} \end{aligned} \quad (5.2.6)$$

Dabei wählen wir im Falle periodischer Randbedingungen die Funktionen r^{ung} , r^{ger} , v^{ung} und v^{ger} als 1-periodisch, während wir für RIEMANN-Probleme davon ausgehen, dass alle vier Funktionen auf der gesamten reellen Achse definiert und außerdem stückweise konstant mit einer gemeinsamen Sprungstelle sind. Wir erinnern daran, dass wir bereits in Abschnitt 2.2.2 diese Art von Anfangsdaten verwendet hatten, und dass die Anfangsdaten (5.2.6) genau dann kalt sind, wenn wir $r^{\text{ung}} = r^{\text{ger}}$ sowie $v^{\text{ung}} = v^{\text{ger}}$ setzen.

Für unsere Simulationen verwenden wir ausschließlich Anfangsdaten in Form von modulierten binären Oszillationen. Aus diesem Grund konnten wir in den Randbedingungen β -KF die Wahl $\beta = 2$ treffen.

Für eine gegebene Teilchenzahl N lösen wir die NEWTONschen Bewegungsgleichungen (2.1.3) mit den VERLET-Verfahren bis zu einer gegebenen makroskopischen Gesamtzeit \bar{t}_{end} . Gemäß der hyperbolischen Skalierung ergibt sich die entsprechende mikroskopische Gesamtzeit t_{end} durch $t_{\text{end}} = N\bar{t}_{\text{end}}$, so dass die Anzahl der Zeitschritte proportional zur Teilchenzahl N ist.

Die Zeitschrittweite $h = \Delta t$ wählen wir hinreichend klein im Vergleich zur intrinsischen Zeitskala, die durch die kleinste inverse Frequenz t_{lin} des linearisierten Problems gegeben ist. Der Wert von t_{lin} kann durch die Zeitperiode t_{BO} des linearisierten binären Oszillators approximiert werden, d.h.

$$t_{\text{lin}} \approx t_{\text{BO}} = \frac{2\pi}{\sqrt{\Phi''(\bar{r})}}. \quad (5.2.7)$$

Dabei ist \bar{r} der lokale Mittelwert der atomaren Abstände, der numerisch gut geschätzt werden kann. In allen numerischen Simulationen haben wir sichergestellt, dass der Quotient $\Delta t/t_{\text{BO}}$ ungefähr den Wert 0.01 hatte.

5.2.3 Fenster in der LAGRANGE-Raum-Zeit

Wir haben bisher in diesem Kapitel beschrieben, wie die atomaren Daten numerisch berechnet werden können. Im Falle mikroskopischer Oszillationen ist aber auch die Auswertung bzw. Weiterverarbeitung der atomaren Daten ein nicht-triviales numerisches Problem. Deshalb wollen wir im Folgenden beschreiben, wie wir

1. makroskopische Mittelwerte berechnen, und
2. die lokalen Verteilungsfunktionen der atomaren Daten bestimmen.

Das wesentliche Hilfsmittel zur Lösung beider Aufgaben sind *Fenster* in der LAGRANGE-Raum-Zeit, die mikroskopisch sehr groß, aber makroskopisch sehr klein sind. Wir verwenden im Folgenden nur Rechteckfenster \mathcal{F} der Form

$$\mathcal{F} = I_{\text{T}}^{\mathcal{F}} \times I_{\text{P}}^{\mathcal{F}}. \quad (5.2.8)$$

Hierbei ist $I_{\text{T}}^{\mathcal{F}}$ ist eine Menge von Zeitschritten, und $I_{\text{P}}^{\mathcal{F}}$ ist eine Menge von Teilchenindizes, so dass

$$I_{\text{T}}^{\mathcal{F}} = \{i^{\mathcal{F}} - A_{\text{T}}^{\mathcal{F}} + 1, \dots, i^{\mathcal{F}} - 1, i^{\mathcal{F}}\}, \quad (5.2.9)$$

$$I_{\text{P}}^{\mathcal{F}} = \{\alpha^{\mathcal{F}} - A_{\text{P}}^{\mathcal{F}}, \dots, \alpha^{\mathcal{F}} - 1, \alpha^{\mathcal{F}}, \alpha^{\mathcal{F}} + 1, \dots, \alpha^{\mathcal{F}} + A_{\text{P}}^{\mathcal{F}}\}. \quad (5.2.10)$$

Hierbei ist $i^{\mathcal{F}}$ ein Zeitschritt, $\alpha^{\mathcal{F}}$ ein Teilchenindex, und $A_{\text{P}}^{\mathcal{F}}$, $A_{\text{T}}^{\mathcal{F}}$ sind zwei ganze Zahlen sind, für die gilt

$$1 \ll A_{\text{P}}^{\mathcal{F}}, A_{\text{T}}^{\mathcal{F}} \ll N. \quad (5.2.11)$$

Wir erwähnen, dass die Asymmetrie der Definitionen von $I_{\text{T}}^{\mathcal{F}}$ und $I_{\text{P}}^{\mathcal{F}}$ nur durch praktische Erwägungen bedingt ist, und nicht in der Natur der Sache liegt. Wir nennen $(t^{\mathcal{F}}, \alpha^{\mathcal{F}})$ das *mikroskopische Zentrum* von \mathcal{F} , wobei $t^{\mathcal{F}}$ die mikroskopische Zeit ist, die dem Zeitschritt $i^{\mathcal{F}}$ entspricht.

Durch die Bedingung (5.2.11) wird sichergestellt, dass alle Fenster die gewünschte Eigenschaft haben, d.h. jedes Fenster \mathcal{F} beschreibt die *mikroskopische Umgebung* für genau einen *makroskopischen Punkt* $Z^{\mathcal{F}} = (\varepsilon t^{\mathcal{F}}, \varepsilon \alpha^{\mathcal{F}})$.

Wir können nun in jedem Fenster \mathcal{F} für jede atomare Größe ψ den Mittelwert $\langle \psi \rangle_{\mathcal{F}}$ berechnen. Für *Ein-Teilchen-Observablen* ψ , deren Wert nur von einem atomaren Abstand und einer atomaren Geschwindigkeit abhängt, ergibt sich $\langle \psi \rangle_{\mathcal{F}}$ aus

$$\langle \psi \rangle_{\mathcal{F}} = \frac{1}{A_{\text{T}}^{\mathcal{F}}(2A_{\text{P}}^{\mathcal{F}} + 1)} \sum_{(i, \alpha) \in \mathcal{F}} \psi(r_{\alpha}^{(i)}, v_{\alpha}^{(i)}). \quad (5.2.12)$$

Für *Mehr-Teilchen-Observablen*, die von mehr als einem Abstand oder mehr als einer Geschwindigkeit abhängen, können leicht analoge Formeln für die entsprechenden Mittelwerte abgeleitet werden.

Wir wollen nun beschreiben, wie für ein gegebenes Fenster \mathcal{F} die lokalen Verteilungsfunktionen im mikroskopischen Phasenraum, die durch die atomaren Daten erzeugt werden, berechnet werden können. Wir erinnern daran, dass der mikroskopischen Phasenraum der zweidimensionalen Raum ist, der durch Abstand und Geschwindigkeit aufgespannt wird.

Für ein gegebenes Fenster \mathcal{F} wählen wir einen rechteckigen Bereich $B^{\mathcal{F}}$ im mikroskopischen Phasenraum der Form

$$B^{\mathcal{F}} = \left\{ (r, v) : r_{\min}^{\mathcal{F}} < r \leq r_{\max}^{\mathcal{F}}, \quad v_{\min}^{\mathcal{F}} < v \leq v_{\max}^{\mathcal{F}} \right\}. \quad (5.2.13)$$

Wir unterteilen die Intervalle $(r_{\min}^{\mathcal{F}}, r_{\max}^{\mathcal{F}}]$ bzw. $(v_{\min}^{\mathcal{F}}, v_{\max}^{\mathcal{F}}]$ in $M_r^{\mathcal{F}}$ bzw. $M_v^{\mathcal{F}}$ äquidistante Teilintervalle mit Halblängen $L_r^{\mathcal{F}}$ bzw. $L_v^{\mathcal{F}}$, und erhalten so eine disjunkte Zerlegung des Gebietes $B^{\mathcal{F}}$ in kleinere Rechtecke $B_{m_r, m_v}^{\mathcal{F}}$ mit

$$B_{m_r, m_v}^{\mathcal{F}} := \left\{ (r, v) : \begin{array}{l} r_{m_r}^{\mathcal{F}} - L_r^{\mathcal{F}} < r \leq r_{m_r}^{\mathcal{F}} + L_r^{\mathcal{F}} \\ v_{m_v}^{\mathcal{F}} - L_v^{\mathcal{F}} < v \leq v_{m_v}^{\mathcal{F}} + L_v^{\mathcal{F}} \end{array} \right\}, \quad (5.2.14)$$

$$r_{m_r}^{\mathcal{F}} := r_{\min}^{\mathcal{F}} + \frac{2m_r - 1}{M_r^{\mathcal{F}}} L_r^{\mathcal{F}}, \quad (5.2.15)$$

$$v_{m_v}^{\mathcal{F}} := v_{\min}^{\mathcal{F}} + \frac{2m_v - 1}{M_v^{\mathcal{F}}} L_v^{\mathcal{F}}, \quad (5.2.16)$$

wobei $m_r = 1 \dots M_r^{\mathcal{F}}$ und $m_v = 1 \dots M_v^{\mathcal{F}}$. Schließlich approximieren wir die Verteilungsfunktion durch eine $M_r^{\mathcal{F}} \times M_v^{\mathcal{F}}$ -Matrix $W^{\mathcal{F}}$, deren Komponenten $W_{m_r, m_v}^{\mathcal{F}}$ sich wie folgt ergeben:

$$W_{m_r, m_v}^{\mathcal{F}} = \mu^{\mathcal{F}} \# \left\{ (i, \alpha) \in \mathcal{F} : (r_{\alpha}^{(i)}, v_{\alpha}^{(i)}) \in B_{m_r, m_v}^{\mathcal{F}} \right\}, \quad (5.2.17)$$

wobei $\#$ die Mächtigkeit einer Menge bezeichnet. Die Konstante $\mu^{\mathcal{F}}$ stellt die richtige Normierung sicher und ergibt sich aus

$$\frac{1}{\mu^{\mathcal{F}}} = 4 L_r^{\mathcal{F}} L_v^{\mathcal{F}} \# \mathcal{F} = 4 L_r^{\mathcal{F}} L_v^{\mathcal{F}} A_T^{\mathcal{F}} (2A_P^{\mathcal{F}} + 1). \quad (5.2.18)$$

Aus der Matrix W können durch Summation auch die reduzierten Verteilungsfunktionen für die atomaren Abstände oder die atomaren Geschwindigkeiten abgeleitet werden. Wir wollen hier auf die Angabe der konkreten Formeln verzichten.

Es ist offensichtlich, dass die Matrix $W^{\mathcal{F}}$ nur dann eine Approximation der Verteilungsfunktion sein kann, wenn der Bereich $B^{\mathcal{F}}$ hinreichend groß ist, so dass für jedes $(i, \alpha) \in \mathcal{F}$ der Punkt $(r_{\alpha}^{(i)}, v_{\alpha}^{(i)})$ in einer der Boxen $B_{m_r, m_v}^{\mathcal{F}}$ liegt. Daher haben wir in den numerischen Simulationen für jedes Fenster \mathcal{F} das Gebiet $B^{\mathcal{F}}$ erst zur Laufzeit festgelegt, wobei dessen Größe durch eine geeignete Heuristik festgelegt wurde.

Wir schließen mit weiteren Bemerkungen zur Implementierung der Raum-Zeit-Fenster:

1. Es ist sinnvoll, zwischen zwei Klassen von Fenstern zu unterscheiden: MW-Fenster bzw. VF-Fenster zur separaten Berechnung der Mittelwerte bzw. der Verteilungsfunktionen. Die Gründe hierfür sind:
 - (i) Um die Abhängigkeit der lokalen Mittelwerte von \bar{t} und $\bar{\alpha}$ genau aufzulösen, benötigen wir vergleichsweise viele MW-Fenster, die aber jeweils nur wenig Speicherplatz belegen.
 - (ii) Die Berechnung von Verteilungsfunktionen führt hingegen zu einer großen Menge von Daten, die zunächst einmal im Arbeitsspeicher repräsentiert werden müssen. Deshalb wird man versuchen, mit möglichst wenigen VF-Fenstern auszukommen.

Außerdem wird man in praktischen Fällen die MW- und VF-Fenster unterschiedlich groß wählen, vgl. dazu die nächste Bemerkung.

2. Wir hatten oben gesagt, dass alle Fenster mikroskopisch sehr groß, aber makroskopisch sehr klein sein sollten. Für sehr große Teilchenzahlen wird man daher etwa $A_T^{\mathcal{F}} \sim \sqrt{N}$ und $A_P^{\mathcal{F}} \sim \sqrt{N}$ setzen. Um aber auch für nicht ganz so große Teilchenzahlen gute Ergebnisse zu erhalten, müssen die Werte für $A_T^{\mathcal{F}}$ und $A_P^{\mathcal{F}}$ „richtig“ gewählt werden. Es gilt die Faustregel, dass die MW-Fenster eher groß sein sollten, damit Oszillationen in den Mittelwerten vermieden werden, und dass die VF-Fenster eher klein sein sollten, damit die Struktur der mikroskopischen Oszillationen möglichst deutlich zu Tage tritt.
3. In unseren numerischen Simulationen haben wir die Parameter $A_T^{\mathcal{F}}$ und $A_P^{\mathcal{F}}$ für die MW- und die VF-Fenster zwar unterschiedlich, ansonsten aber nur in Abhängigkeit von N und von den Anfangsdaten gewählt. Insbesondere hängen diese Größen weder von \bar{t} noch von $\bar{\alpha}$ ab. Für die VF-Fenster haben wir stets $M_r^{\mathcal{F}} = M_v^{\mathcal{F}}$ gesetzt, wobei der Wert dieser Konstanten nur von den Anfangsdaten, aber nicht von N , \bar{t} oder $\bar{\alpha}$, abhängt. Die vier Parameter $r_{\min}^{\mathcal{F}}$, $r_{\max}^{\mathcal{F}}$, $v_{\min}^{\mathcal{F}}$ und $v_{\max}^{\mathcal{F}}$ haben wir in Abhängigkeit von \bar{t} , aber unabhängig von $\bar{\alpha}$, durch eine geeignete Heuristik bestimmt.

<code>N</code>	: die Teilchenzahl N ,
<code>ma_final_time</code>	: die makroskopische Gesamtzeit \bar{t}_{end} ,
<code>mi_final_time</code>	: die mikroskopische Gesamtzeit t_{end} ,
<code>mi_time_delta</code>	: die mikroskopische Zeitschrittweite Δt ,
<code>mi_time_steps</code>	: die Anzahl der mikroskopischen Zeitschritte,
<code>mv_win_t_len</code>	: der Parameter $A_T^{\mathcal{F}}$ für MW-Fenster \mathcal{F} ,
<code>mv_win_p_len</code>	: der Wert $2A_P^{\mathcal{F}} + 1$ für MW-Fenster \mathcal{F} ,
<code>df_win_t_len</code>	: der Parameter $A_T^{\mathcal{F}}$ für VF-Fenster \mathcal{F} ,
<code>df_win_p_len</code>	: der Wert $2A_P^{\mathcal{F}} + 1$ für VF-Fenster \mathcal{F} ,
<code>df_win_prm</code>	: die Parameter $M_r^{\mathcal{F}} = M_v^{\mathcal{F}}$ für VF-Fenster \mathcal{F} .

Tab. 5.1: Die Bedeutung der numerischen Parameter. \diamond

Im weiteren Verlauf werden wir für jede numerische Simulation die Werte der numerischen Parameter explizit angeben, wobei wir auf die in Tabelle 5.1 eingeführten Bezeichnungen zurückgreifen werden.

5.2.4 Die Traveling-Wave eines Fenster

Wir hatten in Kapitel 4 den Mikro-Makro-Übergang mit Temperatur unter der Annahme abgeleitet, dass die oszillierenden atomaren Daten durch modulierte Traveling-Waves beschrieben werden können. Mit Hilfe von Raum-Zeit-Fenstern, welche wie im letzten Abschnitt wieder mikroskopisch groß, aber makroskopisch klein sind, kann nun diese Annahme wie folgt umformuliert werden:

Wenn die atomaren Daten durch modulierte Traveling-Waves beschrieben werden können, so müssen die atomaren Daten sich innerhalb eines Fensters \mathcal{F} wie in einer Traveling-Wave mit konstanten Parametern verhalten, d.h. die Verteilungsfunktion innerhalb von \mathcal{F} sollte der Verteilungsfunktion einer Traveling-Wave mit konstanten Parametern entsprechen. Dabei können die Werte der Traveling-Wave-Parameter von Fenster zu Fenster variieren.

Um unsere Hypothese qualitativ und quantitativ überprüfen zu können, müssen wir in jedem Fenster \mathcal{F} vier Traveling-Wave-Parameter identifizieren, mit deren Hilfe wir dann eine entsprechende Traveling-Wave konstruieren können.

Gemäß Kapitel 3 sind wir in jedem Fenster \mathcal{F} an folgenden Traveling-Wave-Größen interessiert: die spezifische Länge $r_{\mathcal{F}}$, die mittlere Geschwindigkeit $v_{\mathcal{F}}$, die Wellenzahl $k_{\mathcal{F}}$ und ein vierter Parameter, der wahlweise die Frequenz $\omega_{\mathcal{F}}$, die Größe $\gamma_{\mathcal{F}}$, die Temperatur $T_{\mathcal{F}}$ oder die Entropie $S_{\mathcal{F}}$ sein kann.

Über die richtige Wahl von $r_{\mathcal{F}}$ und $v_{\mathcal{F}}$ kann kein Zweifel bestehen: Innerhalb eines jeden Fensters \mathcal{F} sollten sich $r_{\mathcal{F}}$ bzw. $v_{\mathcal{F}}$ als die Mittelwerte der atomaren Abstände bzw. Geschwindigkeiten ergeben. Wir setzen also

$$r_{\mathcal{F}} := \langle r \rangle_{\mathcal{F}} \quad \text{bzw.} \quad v_{\mathcal{F}} := \langle v \rangle_{\mathcal{F}}, \quad (5.2.19)$$

wobei auf den linken Seiten die Observablen r bzw. v für den atomaren Abstand bzw. die atomare Geschwindigkeit stehen. Der Wert der Temperatur $T_{\mathcal{F}}$ kann ebenso einfach identifiziert werden. Es gilt

$$T_{\mathcal{F}} := \langle v^2 \rangle_{\mathcal{F}} - \langle v \rangle_{\mathcal{F}}^2. \quad (5.2.20)$$

Die Bestimmung der Wellenzahl $k_{\mathcal{F}}$ und der Frequenz $\omega_{\mathcal{F}}$ ist wesentlich schwieriger, da diese Größen keine mikroskopische Interpretation besitzen. Um in jedem Fenster \mathcal{F} trotzdem eine eindeutige Wellenzahl $k_{\mathcal{F}}$ und eine eindeutige Frequenz $\omega_{\mathcal{F}}$ zu erhalten, führen wir zwei Ersatzobservablen Ψ_k und Ψ_{ω} ein und setzen

$$k_{\mathcal{F}} := \langle \Psi_k \rangle_{\mathcal{F}} \quad \text{bzw.} \quad \omega_{\mathcal{F}} := \langle \Psi_{\omega} \rangle_{\mathcal{F}}. \quad (5.2.21)$$

Als Ersatzobservablen verwenden wir

$$(\Psi_k)_{\alpha}^{(i)} := \frac{\text{ang} \left(P_{\alpha-1}^{(i)}, P_{\alpha}^{(i)} \right)}{2\pi} \bmod 1, \quad (5.2.22)$$

$$(\Psi_{\omega})_{\alpha}^{(i)} := \left| \frac{\text{ang} \left(P_{\alpha}^{(i-1)}, P_{\alpha}^{(i)} \right)}{2\pi \Delta t} \right|. \quad (5.2.23)$$

Hierbei gilt

$$P_{\alpha}^{(i)} = Q_{\alpha+1}^{(i)} - Q_{\alpha}^{(i)}, \quad Q_{\alpha}^{(i)} = (r_{\alpha}^{(i)}, v_{\alpha}^{(i)}),$$

und $\text{ang}(P_1, P_2)$ ist der Winkel zwischen den Vektoren $P_1 = (r_1, v_1)^T$ und $P_2 = (r_2, v_2)^T$, d.h.

$$\text{ang}(P_1, P_2) = \text{sgn}(+r_1 v_2 - r_2 v_1) \arccos\left(\frac{r_1 r_2 + v_1 v_2}{|P_1| |P_2|}\right).$$

Beachte, dass Ψ_k Werte in $[0, 1]$ annimmt, und dass $\Psi_\omega \geq 0$ gilt. Die Formeln (5.2.22) und (5.2.23) wurden numerisch an exakten Traveling-Wave-Lösungen getestet, für die sie zusammen mit (5.2.21) die richtigen Werte für $k_{\mathcal{F}}$ und $\omega_{\mathcal{F}}$ reproduzieren.

Wir haben nun in jedem Fenster \mathcal{F} die Traveling-Wave-Größen $r_{\mathcal{F}}$, $v_{\mathcal{F}}$, $T_{\mathcal{F}}$, $k_{\mathcal{F}}$ und $\omega_{\mathcal{F}}$ identifiziert. Der Größen $\gamma_{\mathcal{F}}$ und $S_{\mathcal{F}}$ werden konsistent zu Abschnitt 3.1.1 definiert:

$$S_{\mathcal{F}} := \frac{T_{\mathcal{F}}}{\omega_{\mathcal{F}}}, \quad \gamma_{\mathcal{F}} := \frac{T_{\mathcal{F}}}{2\omega_{\mathcal{F}}^2}. \quad (5.2.24)$$

In nächsten Schritt kann mit Hilfe des γ -, des S - oder des T -Schemas (siehe Unterkapitel 3.3) in jedem Fenster \mathcal{F} eine entsprechende Traveling-Wave mit den Profilfunktionen $\mathbb{R}_{\mathcal{F}}$ und $\mathbb{V}_{\mathcal{F}}$ berechnet werden.

In unseren numerischen Simulationen haben wir das T -Schema mit den Parametern $r_{\mathcal{F}}$, $v_{\mathcal{F}}$, $k_{\mathcal{F}}$ und $T_{\mathcal{F}}$ verwendet, wobei wir die in Abschnitt 3.3.3 skizzierte Diskretisierung mit $M = 500$ benutzt haben. Beachte, dass es für $T = 0$ nur die triviale Traveling-Wave mit den Profilfunktionen $\mathbb{V}_{\mathcal{F}} = 0$ und $\mathbb{R}_{\mathcal{F}} = 0$ geben kann. Wir starten daher das T -Schema nur dann, wenn $T_{\mathcal{F}} > 0$ gilt.

Ausgehend von den Profilfunktionen $\mathbb{R}_{\mathcal{F}}$ und $\mathbb{V}_{\mathcal{F}}$ können wir

1. eine entsprechende Verteilungsfunktionen im mikroskopischen Phasenraum ableiten,
2. für jede atomare Observable ψ einen *TW-Mittelwert* $\langle \psi \rangle_{\mathcal{F}}^{\text{TW}}$ berechnen.

Für Ein-Teilchen-Observablen ψ ergibt zum Beispiel der folgende Ausdruck den TW-Mittelwert

$$\langle \psi \rangle_{\mathcal{F}}^{\text{TW}} := \int_0^1 \psi(r_{\mathcal{F}} + \mathbb{R}_{\mathcal{F}}(\varphi + k_{\mathcal{F}}/2), v_{\mathcal{F}} + \omega_{\mathcal{F}} \mathbb{V}_{\mathcal{F}}(\varphi)) \, d\varphi. \quad (5.2.25)$$

Außerdem liefert das T -Schema in jedem Fenster mit $T_{\mathcal{F}} > 0$ einen konkreten Wert für die in Abschnitt 3.1.1 eingeführten Größen: Wir erhalten einen Wert $S_{\mathcal{F}}^{\text{TW}}$ für die Entropie, einen Wert $\omega_{\mathcal{F}}^{\text{TW}}$ für die Frequenz, usw. Einige dieser Traveling-Wave-Größen können als TW-Mittelwerte atomarer Größen dargestellt werden. So gilt zum Beispiel für den Druck $p_{\mathcal{F}}^{\text{TW}}$ die Gleichung

$$p_{\mathcal{F}}^{\text{TW}} = - \int_0^1 \Phi'(r_{\mathcal{F}} + \mathbb{R}_{\mathcal{F}}(\varphi + k_{\mathcal{F}}/2)) \, d\varphi. \quad (5.2.26)$$

Außerdem gelten nach Konstruktion die Identitäten

$$r_{\mathcal{F}}^{\text{TW}} = r_{\mathcal{F}}, \quad v_{\mathcal{F}}^{\text{TW}} = v_{\mathcal{F}}, \quad k_{\mathcal{F}}^{\text{TW}} = k_{\mathcal{F}} \quad \text{und} \quad T_{\mathcal{F}}^{\text{TW}} = T_{\mathcal{F}}. \quad (5.2.27)$$

Allerdings folgt nicht (!), dass $\omega_{\mathcal{F}} = \omega_{\mathcal{F}}^{\text{TW}}$ und $S_{\mathcal{F}} = S_{\mathcal{F}}^{\text{TW}}$ erfüllt sind, oder dass $\langle \psi \rangle_{\mathcal{F}} = \langle \psi \rangle_{\mathcal{F}}^{\text{TW}}$ für beliebiges ψ gilt. Diese Identitäten gilt es zu überprüfen!

Im letzten Schritt können wir in jedem Fenster \mathcal{F} und für jede Observable ψ die Mittelwerte $\langle \psi \rangle_{\mathcal{F}}$ und $\langle \psi \rangle_{\mathcal{F}}^{\text{TW}}$ miteinander vergleichen. Ebenso können wir in jedem Fenster testen, ob die numerisch berechneten Verteilungsfunktionen mit den Verteilungsfunktionen der Traveling-Waves übereinstimmen.

5.2.5 Bezeichnungen

Bevor wir uns den numerischen Simulationen zuwenden, wollen wir folgende Sprechweise verabreden: Die Verteilungsfunktion, die in einem Fenster \mathcal{F} mit dem im letzten Abschnitt beschriebenen Verfahren berechnet wurde, nennen wir die *mikroskopische Verteilung im Fenster \mathcal{F}* . Da die Traveling-Wave-Parameter $r_{\mathcal{F}}$, $v_{\mathcal{F}}$, $k_{\mathcal{F}}$ und $T_{\mathcal{F}}$ nur auf der makroskopischen Skala variieren, nennen wir die Verteilungsfunktion, die aus den Profildfunktionen $\mathbb{V}_{\mathcal{F}}$ und $\mathbb{R}_{\mathcal{F}}$ resultiert, die *makroskopische Vorhersage im Fenster \mathcal{F}* .

Atomare Observable	Definition
Abstand	$r_{\alpha}(t) = x_{\alpha+1}(t) - x_{\alpha}(t)$
Geschwindigkeit	$v_{\alpha}(t) = \dot{x}_{\alpha}(t)$
negative Kraft	$p_{\alpha}(t) = -\Phi'(r_{\alpha}(t))$
Energie	$e_{\alpha}(t) = \frac{1}{2}(v_{\alpha+1}(t))^2 + \Phi(r_{\alpha}(t))$
Energiefluss	$f_{\alpha}(t) = -v_{\alpha}(t) \Phi'(r_{\alpha}(t))$

Tab. 5.2: Liste ausgewählter atomarer Observablen. \diamond

	Mittelwert	TW-Mittelwert
spezifische Länge makroskopische	$r_{\mathcal{F}} = \langle \text{Abstand} \rangle_{\mathcal{F}}$	$r_{\mathcal{F}}^{\text{TW}} = \langle \text{Abstand} \rangle_{\mathcal{F}}^{\text{TW}}$
Geschwindigkeit	$v_{\mathcal{F}} = \langle \text{Geschwind.} \rangle_{\mathcal{F}}$	$v_{\mathcal{F}}^{\text{TW}} = \langle \text{Geschwind.} \rangle_{\mathcal{F}}^{\text{TW}}$
Druck makroskopische	$p_{\mathcal{F}} = \langle \text{neg. Kraft} \rangle_{\mathcal{F}}$	$p_{\mathcal{F}}^{\text{TW}} = \langle \text{neg. Kraft} \rangle_{\mathcal{F}}^{\text{TW}}$
Energiedichte makroskopischer	$e_{\mathcal{F}} = \langle \text{Energie} \rangle_{\mathcal{F}}$	$e_{\mathcal{F}}^{\text{TW}} = \langle \text{Energie} \rangle_{\mathcal{F}}^{\text{TW}}$
Energiefluss	$f_{\mathcal{F}} = \langle \text{Energiefluss} \rangle_{\mathcal{F}}$	$f_{\mathcal{F}}^{\text{TW}} = \langle \text{Energiefluss} \rangle_{\mathcal{F}}^{\text{TW}}$

Tab. 5.3: Mittelwerte zu den Observablen aus Tabelle 5.2. \diamond

Darüber hinaus nennen wir die Mittelwerte $\langle \psi \rangle_{\mathcal{F}}$, und alle aus ihnen algebraisch abgeleiteten Größen, von jetzt ab die *makroskopischen Felder im Fenster \mathcal{F}* , während wir alle mit den Traveling-Waves berechneten Mittelwerte und sonstigen Größen die *TW-Felder im Fenster \mathcal{F}* nennen.

	Feld	TW-Feld
Frequenz	$\omega_{\mathcal{F}}$ ist Mittelwert	$\omega_{\mathcal{F}}^{\text{TW}}$ aus T -Schema
Entropie (-dichte)	$S_{\mathcal{F}} = T_{\mathcal{F}}/\omega_{\mathcal{F}}$	$S_{\mathcal{F}}^{\text{TW}} = T_{\mathcal{F}}^{\text{TW}}/\omega_{\mathcal{F}}^{\text{TW}}$
Wärmefluss	$q_{\mathcal{F}} = f_{\mathcal{F}} - p_{\mathcal{F}} v_{\mathcal{F}}$	$q_{\mathcal{F}}^{\text{TW}} = f_{\mathcal{F}} - p_{\mathcal{F}}^{\text{TW}} v_{\mathcal{F}}^{\text{TW}}$
Entropiefluss	$g_{\mathcal{F}} = q_{\mathcal{F}}/\omega_{\mathcal{F}}$	$g_{\mathcal{F}}^{\text{TW}} = q_{\mathcal{F}}^{\text{TW}}/\omega_{\mathcal{F}}^{\text{TW}}$

Tab. 5.4: Abgeleitete makroskopische Felder (Auswahl). \diamond

In der Tabelle 5.2 haben wir noch einmal die wichtigsten mikroskopischen Observablen zusammengefasst; die entsprechenden Mittelwerte bzw. TW-Mittelwerte können der Tabelle 5.3 entnommen werden. In Tabelle 5.4 haben wir schließlich die wichtigsten makroskopischen Felder aufgelistet, die sich nicht als Mittelwerte atomarer Observablen ergeben.

Zu jedem makroskopischen Punkt $P = (\bar{t}, \bar{\alpha})$ der LAGRANGE-Raum-Zeit existiert ein Fenster \mathcal{F}_P , das die mikroskopische Umgebung dieses Punktes P enthält (d.h. $P = Z^{\mathcal{F}_P}$ im Sinne von Abschnitt 5.2.3). Diese Tatsache erlaubt es uns, die makroskopischen Felder bzw. die TW-Felder als Funktionen von \bar{t} und $\bar{\alpha}$ zu interpretieren.

Abschließend wollen wir daran erinnern, dass der makroskopische Teilchenindex $\bar{\alpha}$ auch als der LAGRANGE-Ort bzw. die LAGRANGE-Position interpretiert werden kann.

5.3 Die Klasse G : Glatte Anfangsdaten

5.3.1 Beispiel $G1$

Als erstes Beispiel der Klasse $G1$ betrachten wir noch einmal das Beispiel $B2$ aus Abschnitt 2.2.2, wobei der Wert der numerischen Parameter aus Tabelle 5.5 entnommen werden kann.

Die Anfangsdaten sind durch die Formeln (2.2.14) und (2.2.15) bzw. durch Abbildung 2.3 gegeben. Beachte, dass wir zur Zeit $\bar{t} = 0$ nur die makroskopische Geschwindigkeit v , aber nicht die spezifische Länge r , die Wellenzahl k oder die innere Energie U modulieren.

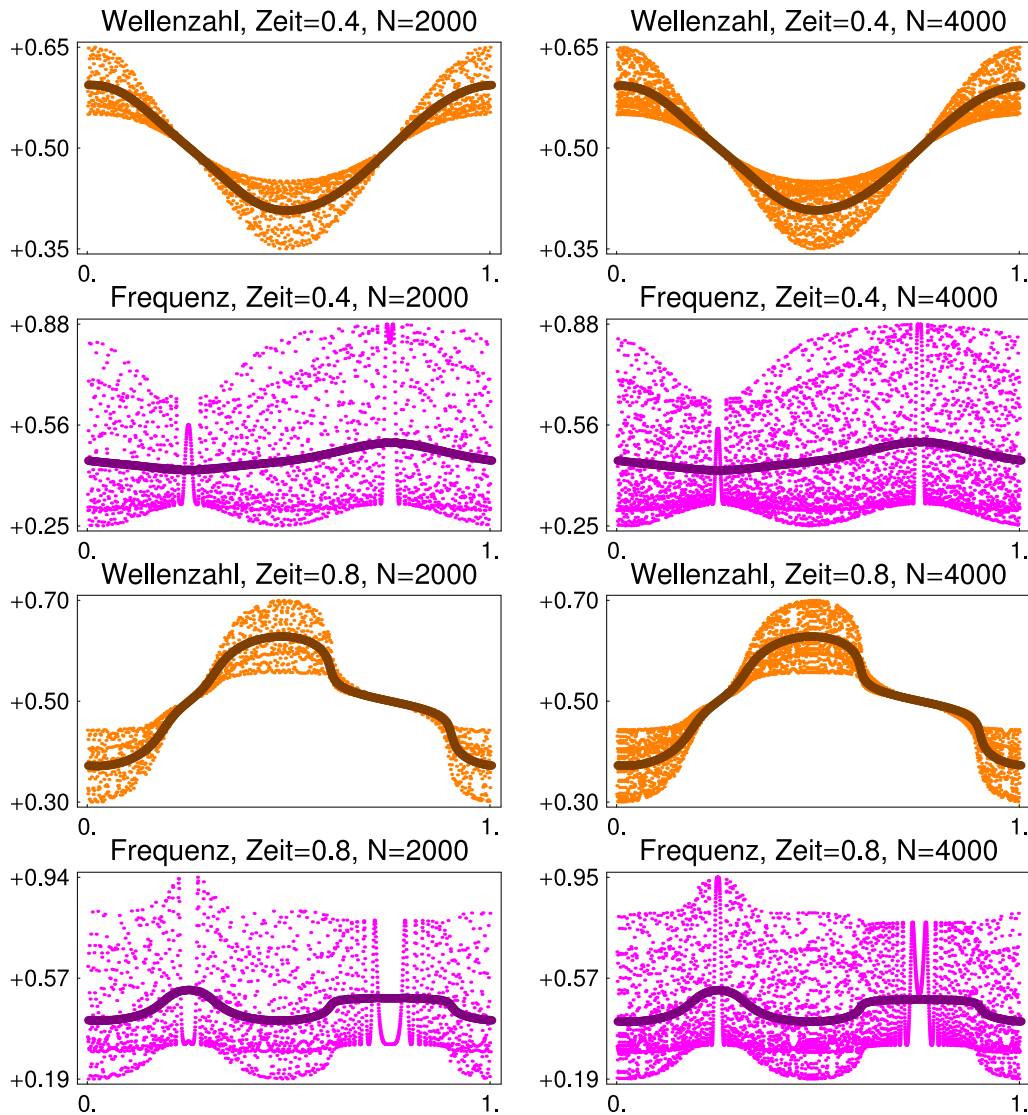


Abb. 5.1: Zur Berechnung der Wellenzahl und der Frequenz für Beispiel $G1$: Wir sehen die Evolution der mikroskopischen Ersatzobservablen Ψ_k und Ψ_ω für verschiedene Zeiten über dem makroskopischen Teilchenindex. Die Wellenzahl und die Frequenz resultieren als die makroskopischen Mittelwerte der Ersatzobservablen. Die linke bzw. rechte Spalte entsprechen wieder $N = 2000$ bzw. $N = 4000$. \diamond

Wir fassen noch einmal unsere Interpretation der Daten zusammen, die wir in Abschnitt 2.2.2 formuliert haben: Die atomaren Daten entwickeln für große Teilchenzahlen starke

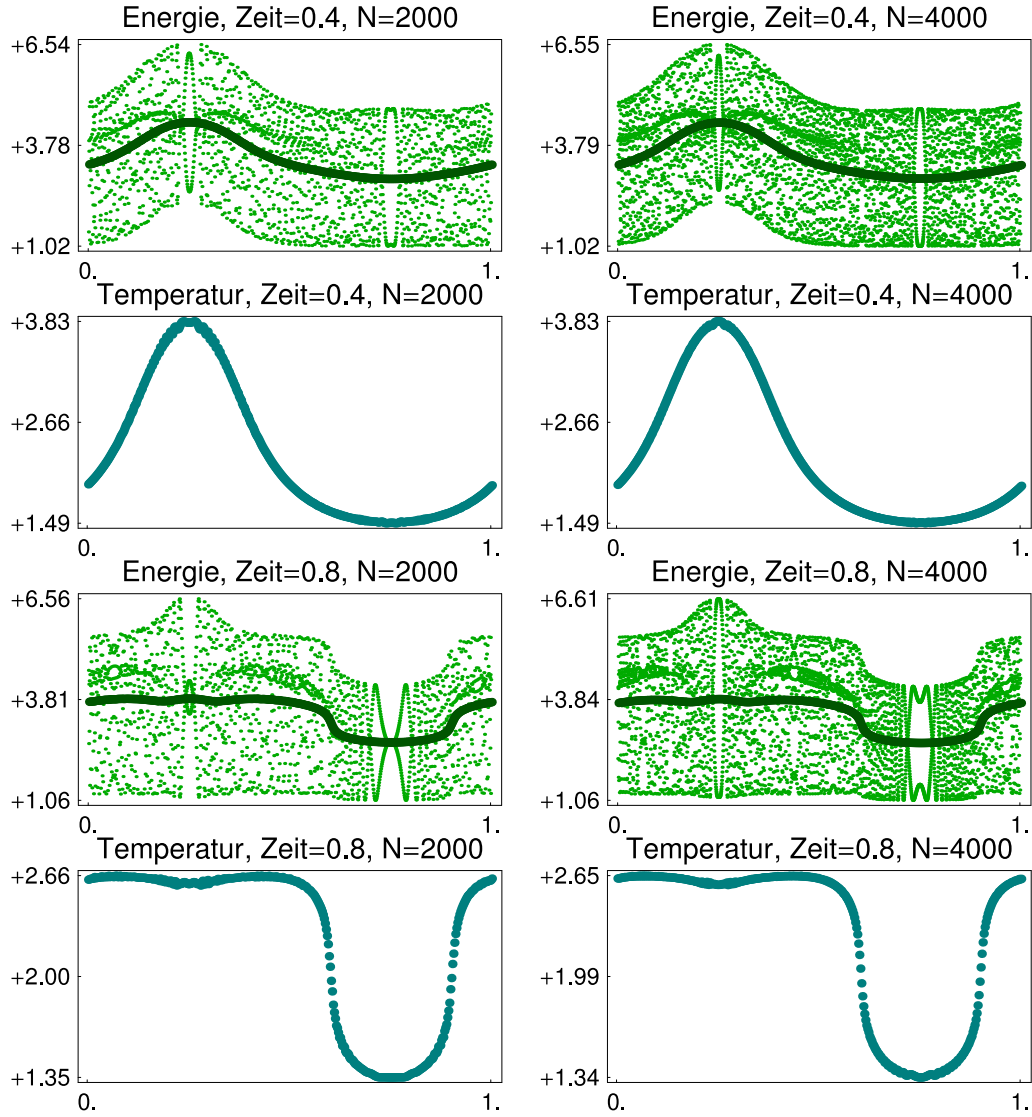


Abb. 5.2: Die atomare Energie E und die makroskopische Temperatur T für Beispiel $G1$ über dem makroskopischen Teilchenindex. \diamond

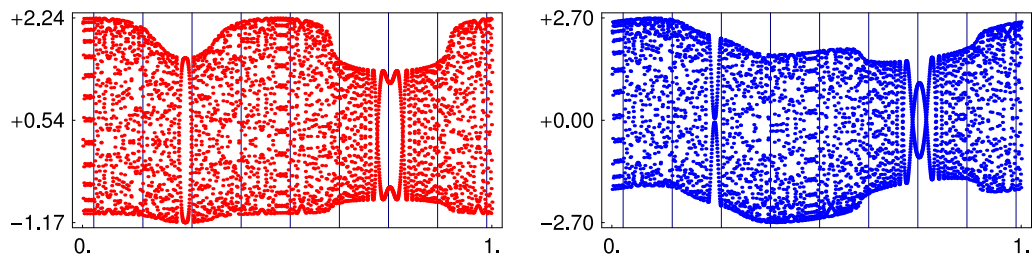


Abb. 5.3: Die vertikalen Linien markieren die LAGRANGE-Orte der makroskopischen Punkte, für die in Abbildung 5.4 die mikroskopischen Verteilungen untersucht werden. Es gilt $\bar{t} = 0.8$. \diamond

mikroskopische Oszillationen, die nicht mehr durch makroskopische Funktionen, sondern nur noch durch YOUNG-Maße beschrieben werden können. Im Limes $N \rightarrow \infty$ konvergieren die YOUNG-Maße gegen ein eindeutiges Grenzwert-Maß. Außerdem werden alle mikroskopischen Oszillationen durch makroskopische Funktionen eingehüllt, die selbst nicht von der

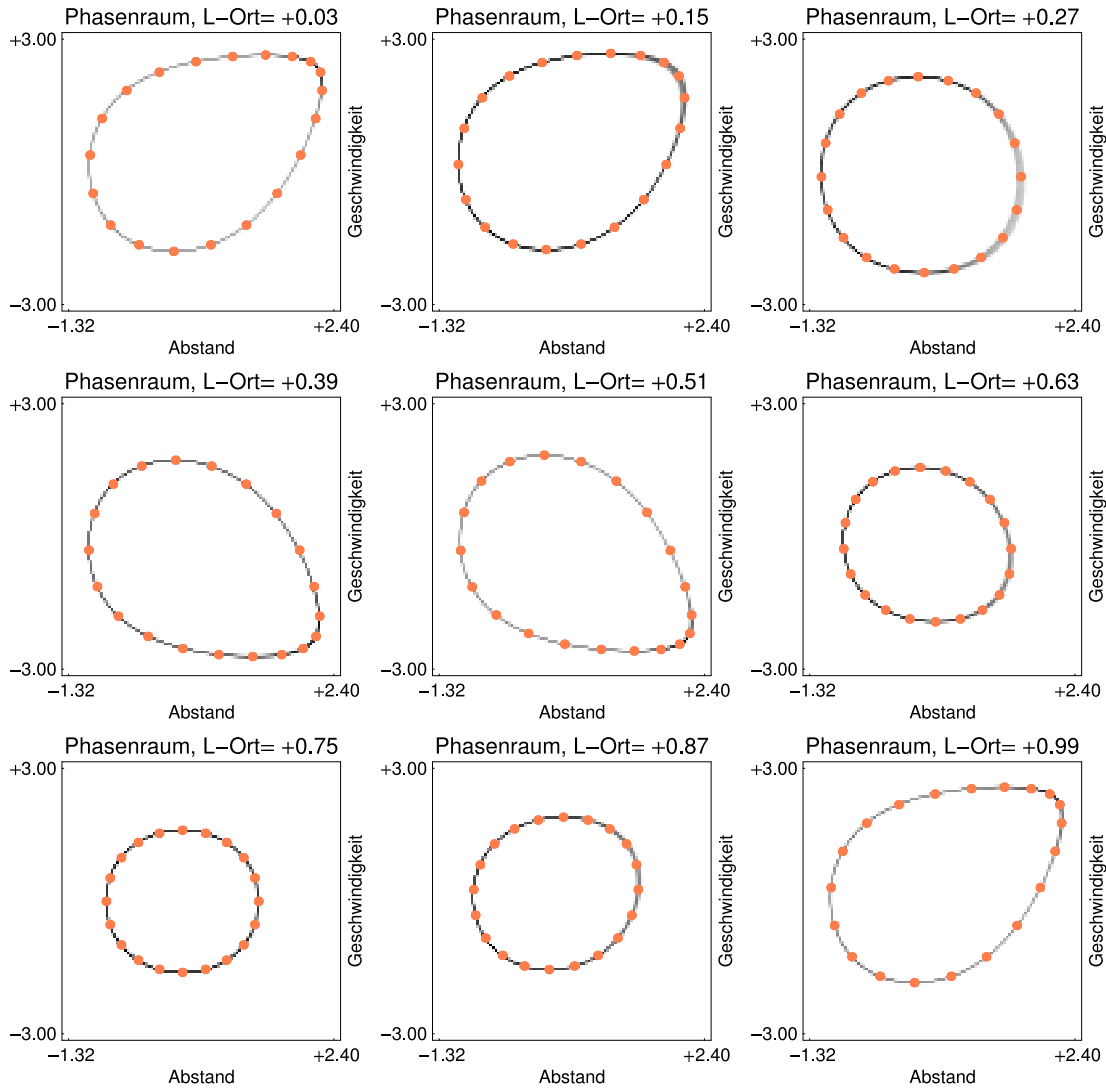


Abb. 5.4: Die lokalen Verteilungsfunktionen im mikroskopischen Phasenraum für Beispiel $G1$ mit $N = 4000$ in den makroskopischen Punkten aus Abbildung 5.3: Grau entspricht den mikroskopischen Verteilungen, Orange den makroskopischen Vorhersagen. \diamond

Teilchenzahl abhängen. Des Weiteren sehen wir in den Abbildungen 2.4 und 2.5, dass die lokalen Mittelwerte der atomaren Daten durch makroskopische Funktionen gegeben sind, die für $N \rightarrow \infty$ im Sinne von Funktionen konvergieren.

In Abschnitt 4.2.3 haben wir gesehen, dass für die harmonische Kette die Modulationsgleichungen in zwei unabhängige Teilsysteme zerfallen, wobei das eine Teilsystem Masse- und Impulserhaltung beschreibt, während das andere aus den Erhaltungsgleichungen für Wellenzahl und Entropie besteht. Deshalb würden die Anfangsdaten (2.2.14)–(2.2.15) bei der harmonischen Kette implizieren, dass sowohl die Wellenzahl k als auch die Entropie S konstant blieben. Hier sehen wir, dass für nichtlineare Wechselwirkungspotentiale alle vier Modulationsgleichungen im Allgemeinen miteinander gekoppelt sind.

Die Berechnung der makroskopischen Wellenzahl k und der makroskopischen Frequenz

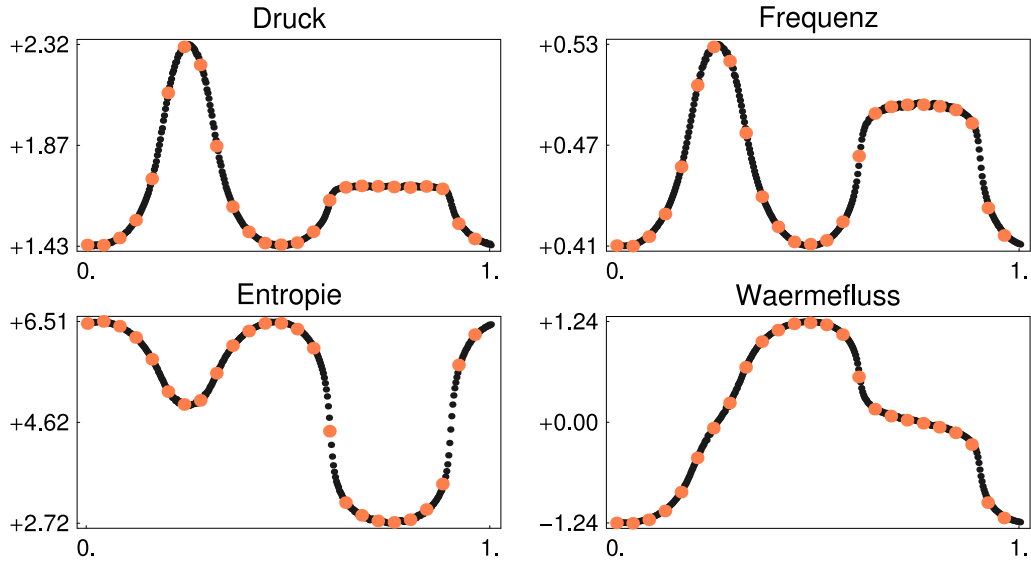


Abb. 5.5: Vergleich zwischen makroskopischen Feldern (Schwarz) und den entsprechenden TW-Feldern (Orange), wobei alle Daten über dem makroskopischen Teilchenindex aufgetragen sind. Es gilt $N = 4000$, $\bar{t} = 0.8$. \diamond

<code>N</code>	<code>=</code>	<code>2000/4000</code>		
<code>ma_final_time</code>	<code>=</code>	<code>5.0E-01</code>	<code>mi_final_time</code>	<code>=</code> <code>1.0E+03/2.0E+03</code>
<code>mi_time_delta</code>	<code>=</code>	<code>1.0E-02</code>	<code>mi_time_steps</code>	<code>=</code> <code>100000/200000</code>
<code>mv_win_t_len</code>	<code>=</code>	<code>3577/5059</code>	<code>mv_win_p_len</code>	<code>=</code> <code>5/10</code>
<code>df_win_t_len</code>	<code>=</code>	<code>3577/5059</code>	<code>df_win_p_len</code>	<code>=</code> <code>10/20</code>
<code>df_win_prm</code>	<code>=</code>	<code>100</code>		

Tab. 5.5: Die numerischen Parameter für Beispiel *G1*. \diamond

ω ist in Abbildung 5.1 illustriert. Dort sehen wir für $\bar{t} = 0.4$ bzw. $\bar{t} = 0.8$ und für $N = 2000$ bzw. $N = 4000$ die Werte der Ersatzobservablen Ψ_k und Ψ_Ω über $\bar{\alpha}$ aufgetragen. Wir beobachten starke mikroskopische Oszillationen in den Ersatzobservablen, sehen aber auch, dass diese Oszillationen für große Teilchenzahlen gegen ein YOUNG-Maß konvergieren. Insbesondere finden wir wieder makroskopische Funktionen, die die mikroskopischen Oszillationen einhüllen. Gemäß der Darstellung in Abschnitt 5.2 resultieren die makroskopischen Felder k und ω , welche wir wieder mit dunkleren Farben gezeichnet haben, als lokale Mittelwerte der atomaren Daten.

Die Abbildung 5.2 zeigt die oszillierende atomare Energie, zusammen mit den makroskopischen Mittelwerten, sowie die makroskopische Temperatur. Damit verfügen wir über die vier makroskopischen Felder, mit denen wir in jedem makroskopischen Punkt das T -Schema zur Berechnung der entsprechenden Traveling-Wave starten können.

Im nächsten Schritt wollen wir die mikroskopischen Verteilungen mit den makroskopischen Vorhersagen vergleichen. Dazu betrachten wir zur Zeit $t = 0.8$ an neun ausgewählten makroskopischen Punkten die mikroskopischen Umgebungen, wobei die genaue Ausdehnung der

entsprechenden Fenster der Tabelle 5.5 entnommen werden kann. Die LAGRANGE-Orte $\bar{\alpha}$ der neun Punkte sind in Abbildung 5.3 durch die vertikalen Linien markiert. Es sind genau dieselben Punkte, für die wir bereits in Abbildung 2.8 die Verteilungsfunktionen im mikroskopischen Phasenraum als Dichtegrafik dargestellt hatten.

Jetzt sind wir allerdings in der Lage, in jedem Fenster \mathcal{F} zusätzlich die makroskopische Vorhersage der mikroskopischen Verteilung zu berechnen. Um einen visuellen Vergleich durchführen zu können, sind wir wie folgt vorgegangen: Zuerst haben wir in jedem Fenster \mathcal{F} für zwanzig äquidistant verteilte Werte der Phase φ den entsprechenden Punkt der Kurve

$$\varphi \mapsto (r_{\mathcal{F}} + \mathbb{R}_{\mathcal{F}}(\varphi + k_{\mathcal{F}}/2), v_{\mathcal{F}} + \omega_{\mathcal{F}} \mathbb{V}_{\mathcal{F}}(\varphi)) \quad (5.3.1)$$

berechnet. Anschließend haben wir diese Punkte mit oranger Farbe in die Dichtegrafik der mikroskopischen Verteilung gezeichnet, siehe Abbildung 5.4.

In allen Bildern beobachten wir, dass (i) die Kurve (5.3.1) genau mit dem Träger der mikroskopischen Verteilung zusammenfällt, und dass (ii) der Abstand zwischen benachbarten orangen Punkten mit zunehmendem Grauwert der mikroskopischen Verteilung immer kleiner wird. Daraus schließen wir, dass die makroskopischen Vorhersagen vollständig mit mikroskopischen Verteilungen übereinstimmen.

Wir wollen erwähnen, dass wir auch die separaten Verteilungsfunktionen für Abstände und Geschwindigkeiten, siehe die Abbildungen 2.6 und 2.7, mit den entsprechenden makroskopischen Vorhersagen vergleichen können, und dass dieser Vergleich ebenfalls positiv ausfällt. Da aber das Ergebnis keine qualitativ neuen Informationen liefert, haben wir auf die grafische Darstellung verzichtet.

In Abbildung 5.5 vergleichen wir schließlich mehrere makroskopischer Felder (schwarz dargestellt) mit den entsprechenden TW-Feldern (orange dargestellt). Alle Daten haben wir für $\bar{t} = 0.8$ mit $N = 4000$ berechnet, um sie dann über $\bar{\alpha}$ aufzutragen. Beachte, dass wir die TW-Felder nur in 25 makroskopischen Punkten berechnet haben.

Im Einzelnen vergleichen wir den Druck p mit dem TW-Druck p^{TW} , die Frequenz ω mit der TW-Frequenz ω^{TW} , die Entropie S mit der TW-Entropie S^{TW} und den Wärmefluss q mit dem TW-Wärmefluss q^{TW} . Zur Definition dieser Größen verweisen wir auf das Unterkapitel 5.2, insbesondere auf die Tabellen 5.3 und 5.4. Wir sehen eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den makroskopischen Feldern, die sich aus lokalen Mittelwerten atomarer Größen ergeben, und den TW-Feldern, die letztlich nur von vier makroskopischen Feldern abhängen.

5.3.2 Beispiel $G2$

Das Beispiel $G2$ ist ein weiteres Beispiel für die Evolution glatter Anfangsdaten, wobei wir hier ein atomares Wechselwirkungspotential verwenden, das nicht integrabel ist. Konkret haben wir einen Term vierter Ordnung zum TODA-Potential addiert, d.h. es gilt

$$\Phi(r) = \exp((1-r)) - (1-r) + \frac{1}{40}(r-1)^4. \quad (5.3.2)$$

Da wir im Folgenden für $N \rightarrow \infty$ dasselbe qualitative Verhalten wie in Beispiel $G1$

N	$=$	$2000/8000$		
ma_final_time	$=$	$0.9E+00$	mi_final_time	$=$ $1.8E+03/7.2E+03$
mi_time_delta	$=$	$2.0E-02$	mi_time_steps	$=$ $90000/360000$
$mv_win_t_len$	$=$	$2236/4472$	$mv_win_p_len$	$=$ $10/40$
$df_win_t_len$	$=$	$2236/4472$	$df_win_p_len$	$=$ $40/89$
df_win_prm	$=$	100		

Tab. 5.6: Die numerischen Parameter für Beispiel $G2$. \diamond

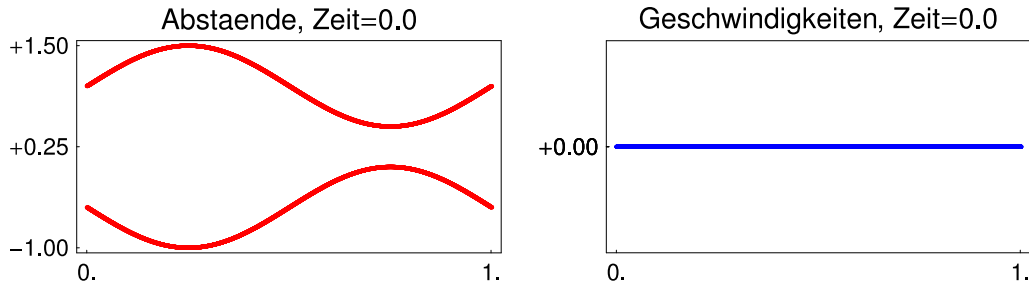


Abb. 5.6: Modulierte atomare Anfangsdaten für Beispiel $G2$ über dem makroskopischen Teilchenindex. \diamond

beobachten, schließen wir, dass die Integrabilität des TODA-Potentials zur Etablierung des Mikro-Makro-Überganges nicht wesentlich ist.

Die Anfangsdaten für Beispiel $G2$ sind in Abbildung 5.6 dargestellt. Es gilt $v^{\text{ung}}(\bar{\alpha}) = v^{\text{ger}}(\bar{\alpha}) = 0$ und

$$r^{\text{ung}}(\bar{\alpha}) = 1 + \frac{1}{2} \sin(2\pi\bar{\alpha}), \quad r^{\text{ger}}(\bar{\alpha}) = -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin(2\pi\bar{\alpha}).$$

Beachte, dass wir in den Anfangsdaten nur die Entropie S bzw. die Frequenz ω modulieren, so dass insbesondere die spezifische Länge r und die makroskopische Geschwindigkeit v zur Zeit $\bar{t} = 0$ konstant sind. Für die harmonische Kette bedeutet diese Art von Anfangsdaten, dass r und v für alle Zeiten konstant sind. Die Nichtlinearität des Wechselwirkungspotentials wird hier jedoch zu einer echten Evolution von r und v führen.

Wir haben die NEWTONschen Bewegungsgleichungen für die Teilchenzahlen $N = 2000$ und

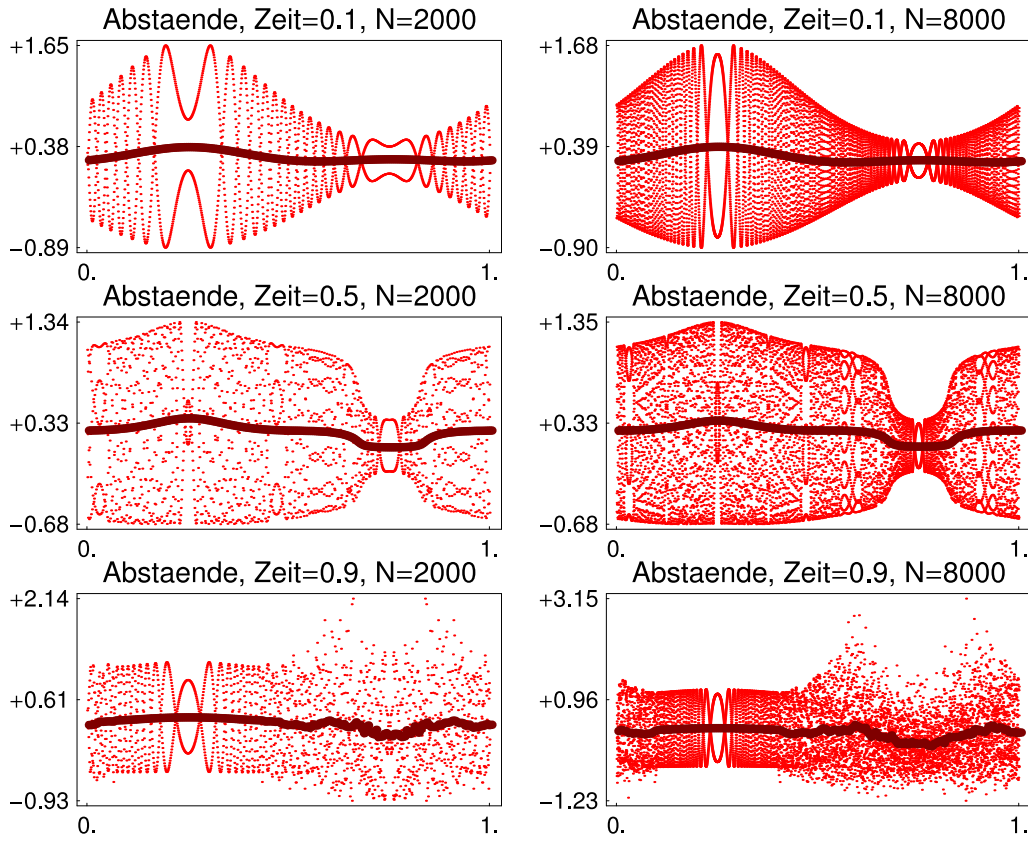


Abb. 5.7: Evolution der atomaren Abstände in Beispiel $G2$ für zwei Teilchenzahlen und verschiedene makroskopische Zeiten, dargestellt über dem makroskopischen Teilchenindex. Die linke bzw. rechte Spalte entsprechen $N = 2000$ bzw. $N = 8000$. Die dunkler gefärbten Funktionen sind die makroskopischen Mittelwerte. \diamond

$N = 8000$ bis zur Zeit $\bar{t} = 0.9$ numerisch gelöst; die Werte der numerischen Parameter sind in Tabelle 5.6 zusammengefasst. Die resultierenden atomaren Abstände und Geschwindigkeiten sind für $\bar{t} = 0.1$, $\bar{t} = 0.5$ und $\bar{t} = 0.9$ in den Abbildungen 5.7 und 5.8 über dem makroskopischen Teilchenindex $\bar{\alpha}$ dargestellt, wobei wir die lokalen Mittelwerte wieder mit dunkleren Farben gezeichnet haben.

Bis zur Zeit $\bar{t} \approx 0.5$ beobachten wir dasselbe qualitative Verhalten wie in Beispiel $G1$: Die YOUNG-Maße konvergieren für $N \rightarrow \infty$ und werden wieder durch makroskopische Funktionen eingehüllt. Außerdem konvergieren die makroskopischen Mittelwerte für $N \rightarrow \infty$ im Sinne von Funktionen.

In Abbildung 5.10 haben wir für neun makroskopische Punkte zur Zeit $\bar{t} = 0.5$, siehe Abbildung 5.10, (i) die mikroskopischen Verteilungen als Dichtegrafik dargestellt, und (ii) die makroskopischen Vorhersagen durch zwanzig Punkte der Kurve (5.3.1) approximiert. Wir sehen, dass (i) die Träger der mikroskopischen Verteilungen wieder exakt auf den Kurven der Form (5.3.1) liegen, und dass (ii) der inverse Abstand benachbarter oranger Punkte wieder mit dem Grauwert der mikroskopischen Verteilungen wächst. Das heißt, bis zur Zeit $\bar{t} \approx 0.5$ können die mikroskopischen Oszillationen in der Tat durch modulierte Traveling-Waves beschrieben werden. Dementsprechend finden wir in Abbildung 5.11 wieder

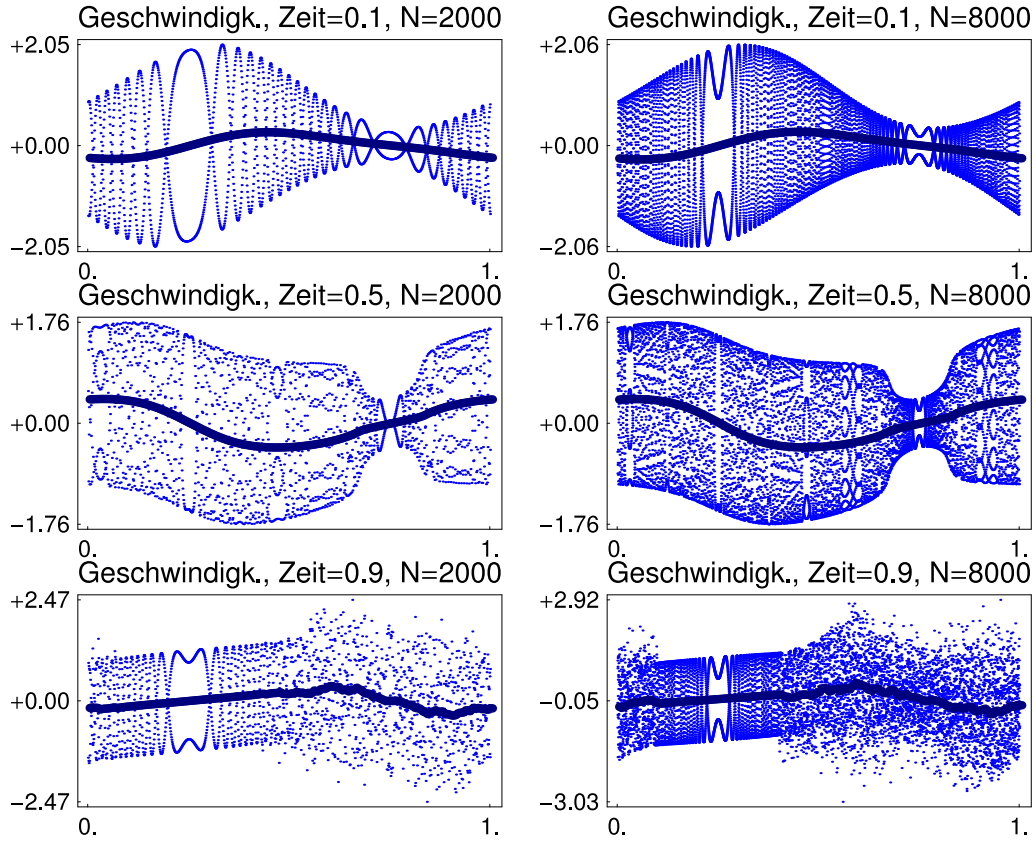


Abb. 5.8: Die atomaren Geschwindigkeiten zu den Abständen aus Abbildung 5.7. \diamond

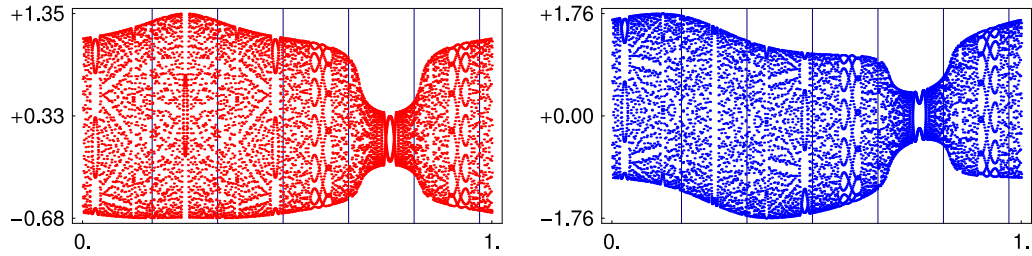


Abb. 5.9: Die vertikalen Linien markieren die LAGRANGE-Orte der makroskopischen Punkte, für die in die Abbildung 5.10 die mikroskopischen Verteilungen untersucht werden. Es gilt $\bar{t} = 0.5$. \diamond

eine sehr gute Übereinstimmung zwischen makroskopischen Feldern und TW-Feldern.

Zur Zeit $\bar{t} = 0.9$ können wir deutlich einen Bereich identifizieren, in etwa $0.4 \lesssim \bar{\alpha} \lesssim 1.1$, in dem die mikroskopischen Oszillationen ein qualitativ anderes Verhalten aufweisen. Insbesondere ist es hier nicht möglich, makroskopische Einhüllende zu definieren. In Abbildung 5.13 haben wir die mikroskopischen Verteilungen in ausgewählten makroskopischen Punkten zur Zeit $\bar{t} = 0.9$ dargestellt, vgl. auch Abbildung 5.12. Während für die ersten drei Punkte die Träger der mikroskopischen Verteilungen weiterhin auf geschlossenen Kurven liegen, finden wir in letzten drei Punkten Verteilungsfunktionen, deren Träger nicht mehr durch eindimensionale Kurven beschrieben werden können. Aus beiden Befunden schließen wir, dass zur Zeit $\bar{t} = 0.9$ die mikroskopischen Oszillationen nicht mehr durch

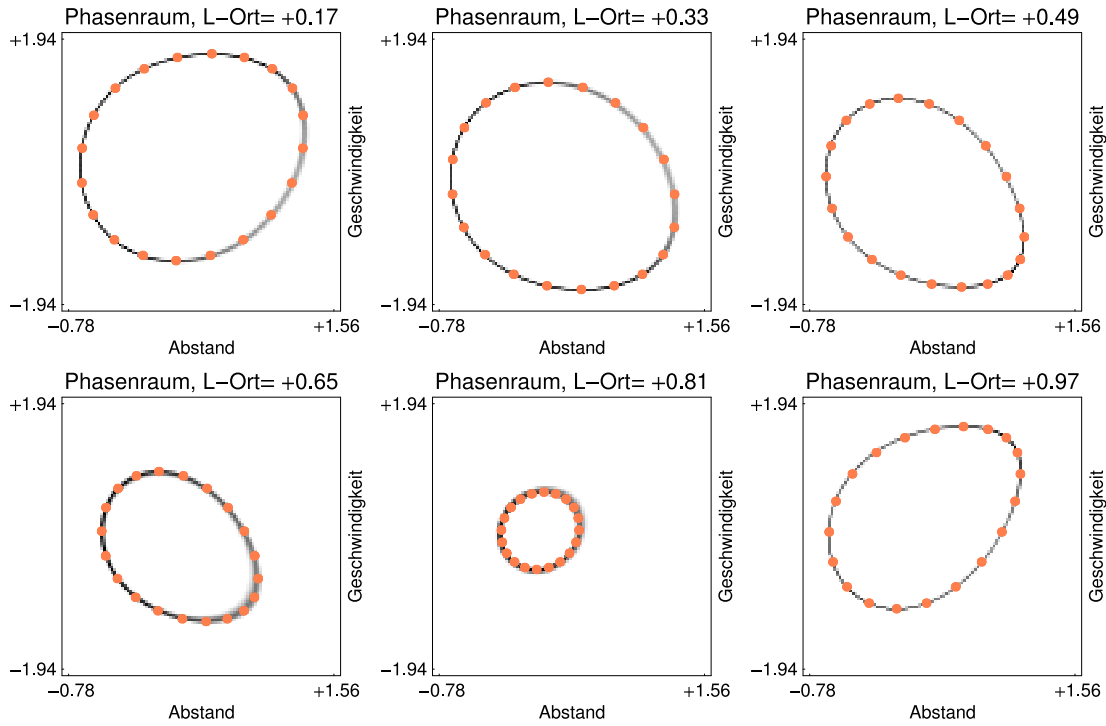


Abb. 5.10: Die lokalen Verteilungsfunktionen im mikroskopischen Phasenraum für Beispiel $G2$ mit $N = 8000$ in den makroskopischen Punkten aus Abbildung 5.9: Grau entspricht den mikroskopischen Verteilungen, Orange den makroskopischen Vorhersagen. **Interpretation:** Bis zur Zeit $\bar{t} = 0.5$ können die mikroskopischen Oszillationen durch modulierte Traveling-Waves beschreiben werden. \diamond

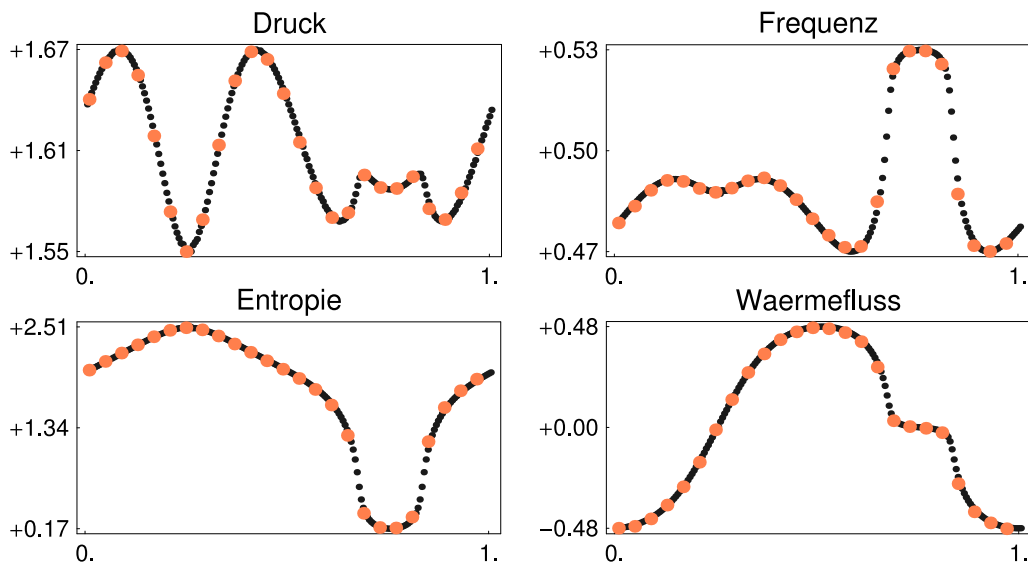


Abb. 5.11: Vergleich zwischen makroskopischen Feldern (Schwarz) und den entsprechenden TW-Feldern (Orange), wobei alle Daten über dem makroskopischen Teilchenindex aufgetragen sind. Es gilt $N = 8000$ und $\bar{t} = 0.5$. \diamond

modulierte Traveling-Waves beschrieben werden können.

Die Abbildung 5.14 liefert uns eine Erklärung, warum die mikroskopischen Oszillationen sich nun anders verhalten. In dieser Abbildung haben wir ausgewählte makroskopische Fel-

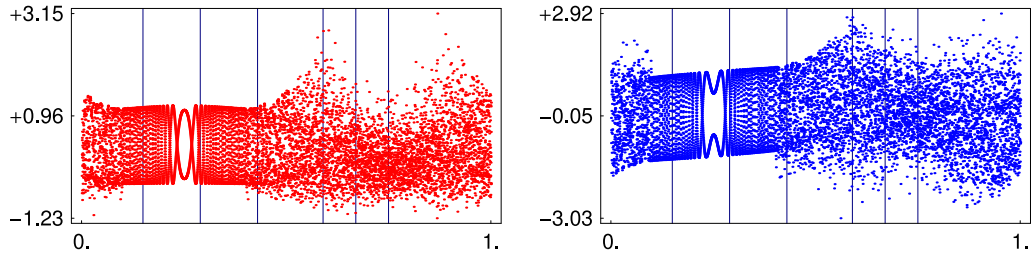


Abb. 5.12: Die vertikalen Linien markieren die LAGRANGE-Orte der makroskopischen Punkte, für die in Abbildung 5.13 die mikroskopischen Verteilungen untersucht werden. Es gilt $\bar{t} = 0.9$. \diamond

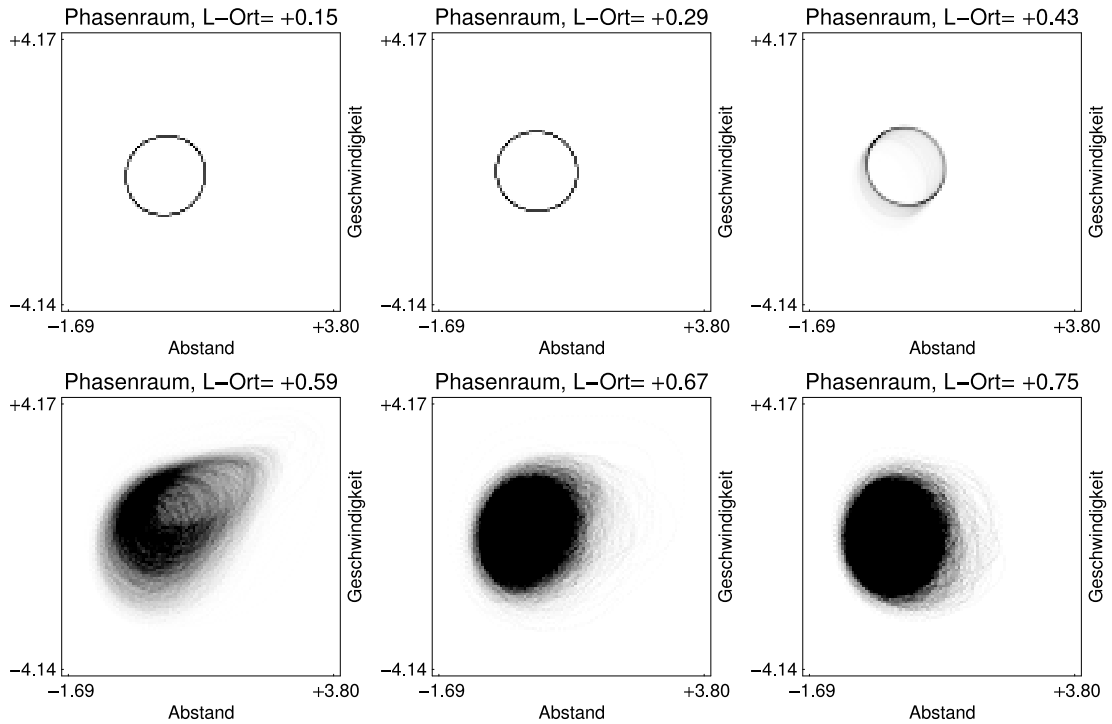


Abb. 5.13: Die lokalen Verteilungsfunktionen im mikroskopischen Phasenraum für Beispiel G_2 mit $N = 8000$ in den makroskopischen Punkten aus Abbildung 5.12. **Interpretation:** Nachdem sich makroskopische Unstetigkeiten entwickelt haben, können die mikroskopischen Verteilungen nicht mehr durch modulierte Traveling-Waves beschrieben werden. \diamond

der zu den Zeiten $\bar{t} = 0.5$ und $\bar{t} = 0.6$ über $\bar{\alpha}$ aufgetragen. Wir beobachten, dass die Gradienten der Felder immer steiler werden, so dass sich schließlich zur Zeit $\bar{t} \approx 0.6$ makroskopische Unstetigkeiten entwickeln. Diese Unstetigkeiten sind der Grund dafür, dass die mikroskopischen Oszillationen nun nicht mehr durch modulierte Traveling-Waves beschrieben werden können.

Im weiteren Verlauf dieses Kapitels werden wir makroskopische Unstetigkeiten noch eingehender untersuchen.

Wir haben in den letzten beiden Beispielen gesehen, dass Anfangsdaten in Form modulierter binärer Oszillationen zu mikroskopischen Oszillationen führen, die – zumindest für hinreichend kleine makroskopische Zeiten – durch modulierte Traveling-Waves beschrieben

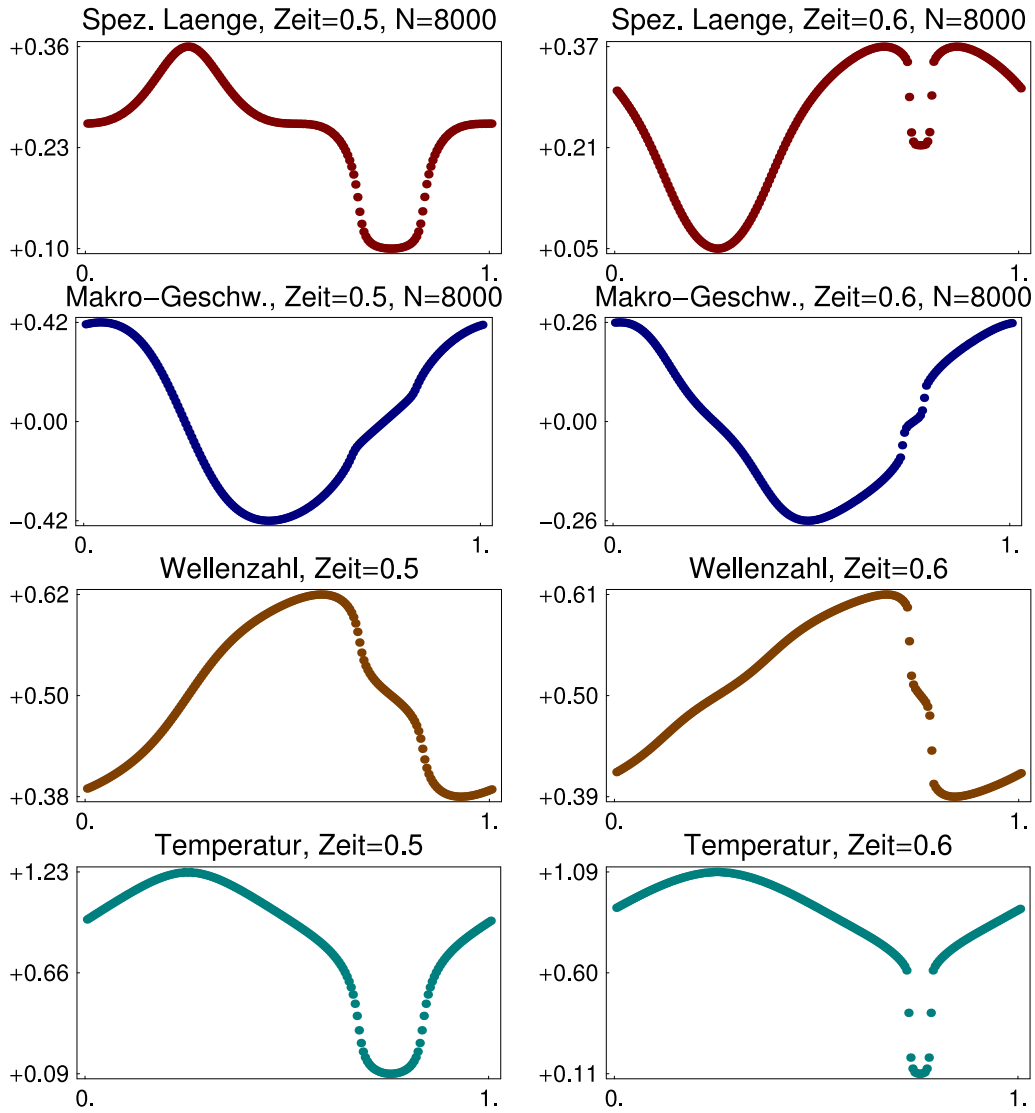


Abb. 5.14: Die Entstehung makroskopischer Unstetigkeiten in Beispiel $G2$ für $N = 8000$. Alle makroskopischen Felder sind über dem makroskopischen Teilchenindex aufgetragen. \diamond

werden können. In beiden Fällen beobachten wir jedoch für alle Zeiten $\bar{t} > 0$ eine echte Modulation der Wellenzahl k . DREYER und KUNIK bzw. DREYER und der Autor haben in [DK00] bzw. [DH02] einen Mikro-Makro-Übergang unter der Annahme durchgeführt, dass alle auftretenden mikroskopischen Oszillationen durch modulierte binäre Oszillationen beschrieben werden können. Wir sehen nun, dass diese Annahme zu optimistisch war.

5.3.3 Beispiel $G3$

Im Beispiel $G3$ kehren wir noch einmal zu Beispiel $B1$ aus Abschnitt 2.2.2 zurück. Dort hatten wir modulierte kalte Anfangsdaten der atomaren Kette betrachtet, siehe Formel (2.2.11) bzw. Abbildung 2.1. Auf Grund der numerischen Simulationen mit $N = 100$ und $N = 16000$ hatten wir in Abbildung 2.2 gesehen, dass die atomaren Daten bis zur Zeit $\bar{t} \approx 0.5$ keine mikroskopischen Oszillationen entwickeln, und deshalb für große N durch makroskopische Funktionen beschrieben werden können. Zur Zeit $\bar{t} \approx 0.5$ bilden sich dann makroskopische Unstetigkeiten, die zu starken mikroskopischen Oszillationen führen.

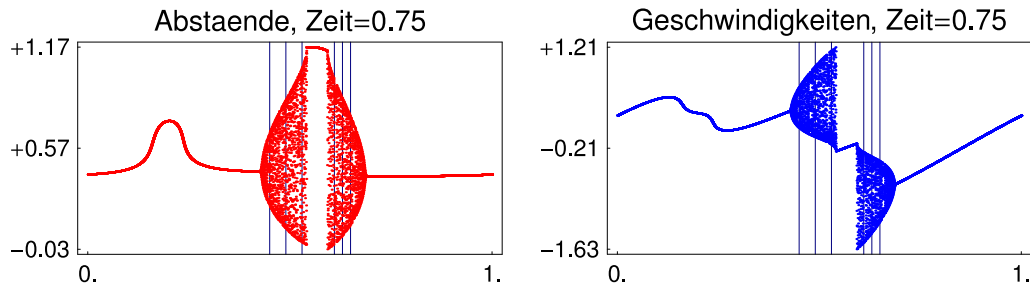


Abb. 5.15: Die atomaren Abstände und Geschwindigkeiten in Beispiel $G3$ für $\bar{t} = 0.75$ und $N = 16000$, dargestellt über dem makroskopischen Teilchenindex. Die vertikalen Linien markieren die LAGRANGE-Orte der makroskopischen Punkte, in denen die mikroskopischen Verteilungen untersucht werden (vgl. Abbildung 5.16). \diamond

N	=	16000		
<code>ma_final_time</code>	=	7.5E-01	<code>mi_final_time</code>	= 1.2E+04
<code>mi_time_delta</code>	=	1.0E-02	<code>mi_time_steps</code>	= 1200000
<code>mv_win_t_len</code>	=	9486	<code>mv_win_p_len</code>	= 80
<code>df_win_t_len</code>	=	9486	<code>df_win_p_len</code>	= 126
<code>df_win_prm</code>	=	100		

Tab. 5.7: Die numerischen Parameter für Beispiel $G3$ mit $N = 16000$. \diamond

Wir weisen wir darauf hin, dass die Modulationsgleichungen (4.2.32) auch die Evolution kalter Daten beschreiben können, da sich das System (4.2.32) für $T \rightarrow 0$ zumindest formal auf das System (2.2.36) reduziert, welches wir in Abschnitt 2.2.6 für den thermodynamischen Limes kalter Daten abgeleitet hatten.

Jetzt wollen wir die Struktur der mikroskopischen Oszillationen, die aus kalten Daten entstehen, eingehender untersuchen. Dazu betrachten wir für $N = 16000$ in sechs makroskopischen Punkten zur Zeit $\bar{t} = 0.75$ (siehe Abbildung 5.15) die mikroskopischen Verteilungen, und vergleichen diese wieder mit den makroskopischen Vorhersagen.

Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.16 dargestellt. Wir beobachten wieder eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den mikroskopischen Verteilungen und den makroskopischen

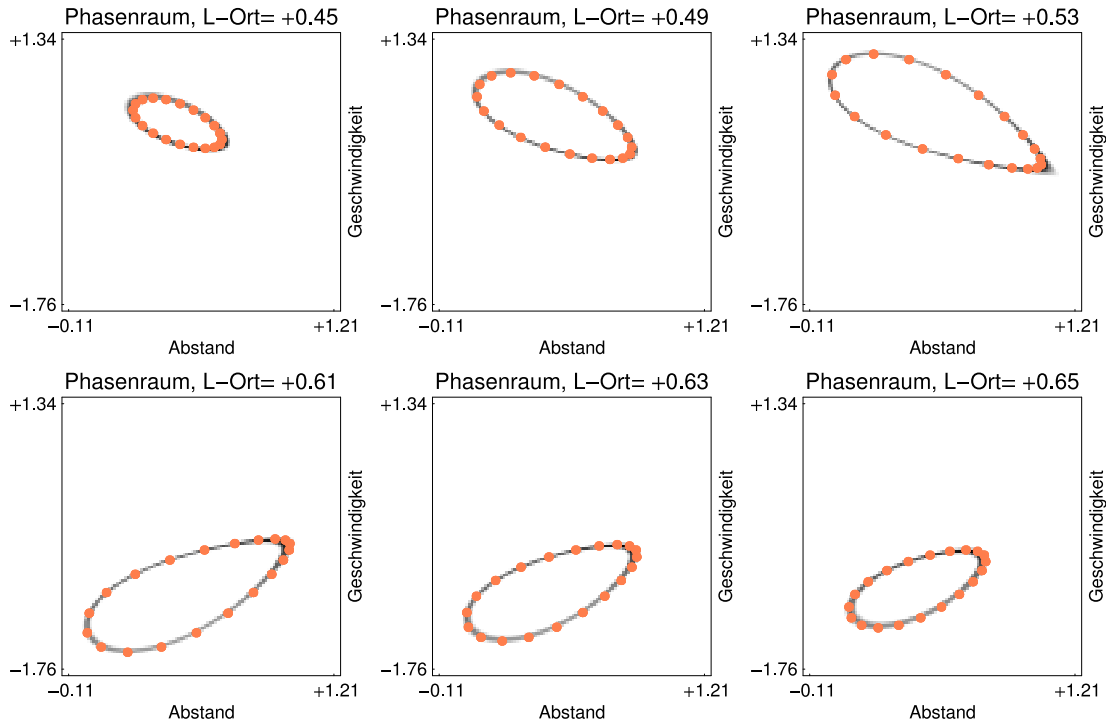


Abb. 5.16: Die lokalen Verteilungsfunktionen im mikroskopischen Phasenraum für Beispiel $G3$ mit $N = 16000$ in den makroskopischen Punkten aus Abbildung 5.15: Grau entspricht den mikroskopischen Verteilungen, Orange den makroskopischen Vorhersagen. **Interpretation:** Aus den kalten Daten hat sich Temperatur entwickelt. Obwohl makroskopische Unstetigkeiten auftreten, entsprechen die mikroskopischen Verteilungen immer noch modulierten Traveling-Waves. \diamond

Vorhersagen. Daraus schließen wir, dass die Modulationsgleichungen (4.2.32) makroskopische Unstetigkeiten, die sich aus kalten Daten entwickeln, noch beschreiben können. Beachte, dass wir im letzten Beispiel gesehen hatten, dass makroskopische Unstetigkeiten, die sich aus Daten mit Temperatur entwickeln, im Allgemeinen nicht mehr durch die Modulationsgleichungen beschrieben werden können.

5.3.4 Beispiel $G4$

In den bisherigen Beispielen haben wir immer nur konvexe Wechselwirkungspotentiale betrachtet. Mit dem Beispiel $G4$ wollen wir illustrieren, dass diese Einschränkung sehr wesentlich ist. Dazu betrachten wir das nicht-konvexe Wechselwirkungspotential

$$\Phi(r) = +2 \cosh(2-r) - \sinh(1)(r-2)^2. \quad (5.3.3)$$

Dieses Potential besitzt zwei stabile Minima bei $r = 1$ und $r = 3$ sowie ein instabiles

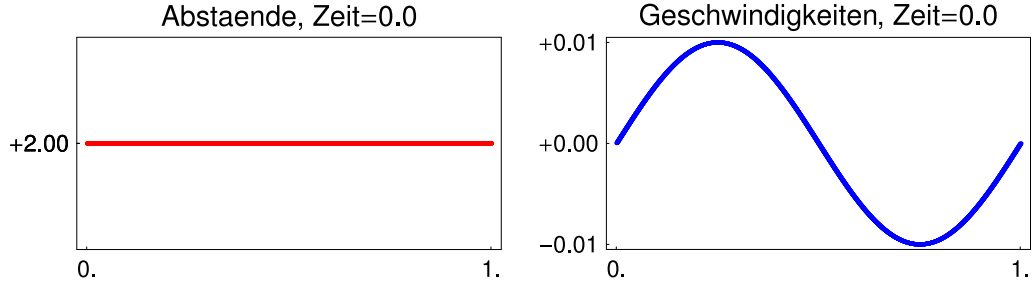


Abb. 5.17: Modulierte atomare Anfangsdaten für Beispiel $G4$ über dem makroskopischen Teilchenindex. \diamond

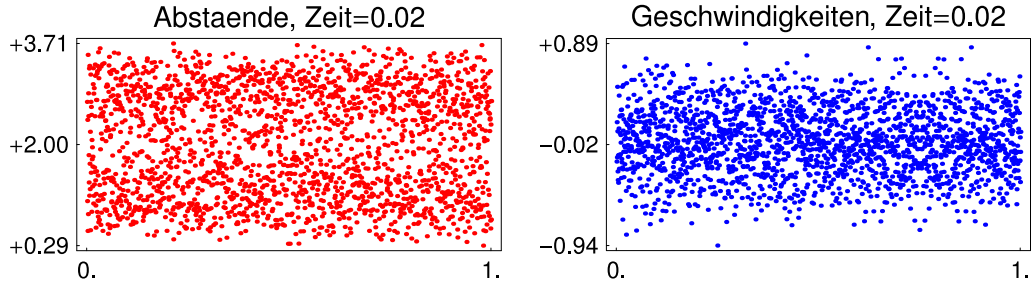


Abb. 5.18: Die atomaren Abstände und Geschwindigkeiten in Beispiel $G4$ für $\bar{t} = 0.02$ und $N = 2000$, dargestellt über dem makroskopischen Teilchenindex. \diamond

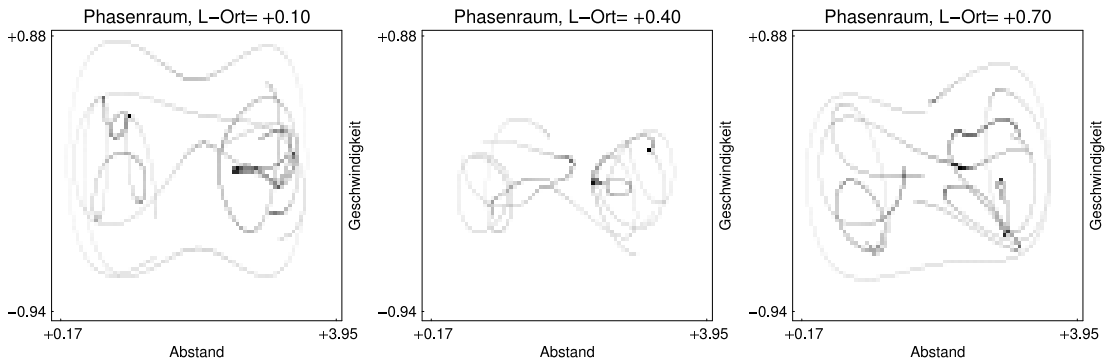


Abb. 5.19: Die numerisch berechneten Verteilungsfunktionen in drei makroskopischen Punkten. **Interpretation:** Im Fall nicht-konvexer Potentiale können selbst für kalte Daten und für sehr kurze makroskopische Zeiten die mikroskopischen Verteilungen nicht durch modulierte Traveling-Waves beschrieben werden. \diamond

N	=	2000		
ma_final_time	=	2.0E-02	mi_final_time	= 4.0E+01
mi_time_delta	=	2.5E-03	mi_time_steps	= 16000
df_win_t_len	=	4000	df_win_p_len	= 5
df_win_prm	=	75		

Tab. 5.8: Die numerischen Parameter für Beispiel G4. \diamond

Maximum bei $r = 2$.

Zur Zeit $\bar{t} = 0$. initialisieren wir die atomare Kette für $N = 2000$ mit kalten Anfangsdaten, siehe Abbildung 5.17. Konkret gilt

$$r^{\text{ung}}(\bar{\alpha}) = r^{\text{ger}}(\bar{\alpha}) = 2, \quad v^{\text{ung}}(\bar{\alpha}) = v^{\text{ger}}(\bar{\alpha}) = \frac{1}{10} \cos(2\pi\bar{\alpha}).$$

In Abbildung 5.18 haben wir die resultierenden atomaren Daten zur Zeit $\bar{t} = 0.02$ dargestellt. Wir sehen, dass die atomaren Daten selbst für kleine makroskopische Zeiten sofort mikroskopische Oszillationen entwickeln. In Abbildung 5.19 sehen wir außerdem, dass die mikroskopischen Oszillationen nicht durch modulierte Traveling-Waves beschrieben werden können. Dieses Ergebnis ist insofern nicht überraschend, da das System (2.2.36), welches den thermodynamischen Limes kalter Daten beschreibt, für nicht-konvexe Wechselwirkungspotentiale nicht hyperbolisch ist.

5.4 Die Klasse R : RIEMANN-Probleme

In diesem Unterkapitel betrachten wir die numerischen Simulationen dreier RIEMANN-Probleme.

Wir erinnern daran, dass wir für alle Simulationen die Randbedingung β -KF mit $\beta = 2$ verwendet haben.

5.4.1 Beispiel $R1$

Im ersten Beispiel der Klasse R betrachten wir kalte Anfangsdaten mit einer einzigen Unstetigkeit bei $\bar{\alpha} = 0.5$. Dabei gilt $v^{\text{ung}}(\bar{\alpha}) = v^{\text{ger}}(\bar{\alpha}) = 0$ und

$$r^{\text{ung}}(\bar{\alpha}) = r^{\text{ger}}(\bar{\alpha}) = \begin{cases} 0 & \text{falls } \bar{\alpha} < 0.5, \\ 1 & \text{falls } \bar{\alpha} \geq 0.5. \end{cases}$$

Die resultierenden atomaren Abstände und Geschwindigkeiten für $N = 16000$ sind in

<code>N</code>	<code>=</code>	<code>16000</code>		
<code>ma_final_time</code>	<code>=</code>	<code>3.0E-01</code>	<code>mi_final_time</code>	<code>= 4.8E+03</code>
<code>mi_time_delta</code>	<code>=</code>	<code>4.0E-03</code>	<code>mi_time_steps</code>	<code>= 1200000</code>
<code>mv_win_t_len</code>	<code>=</code>	<code>9486</code>	<code>mv_win_p_len</code>	<code>= 80</code>
<code>df_win_t_len</code>	<code>=</code>	<code>9486</code>	<code>df_win_p_len</code>	<code>= 126</code>
<code>df_win_prm</code>	<code>=</code>	<code>100</code>		

Tab. 5.9: Die numerischen Parameter für Beispiel $R1$. \diamond

Abbildung 5.20 zu den Zeiten $\bar{t} = 0.$, $\bar{t} = 0.15$ und $\bar{t} = 0.3$ über dem makroskopischen Teilchenindex aufgetragen. Die Daten können wie folgt interpretiert werden:

1. Es gibt eine kalte Verdünnungswelle, die sich nach links bewegt. Links dieser Verdünnungswelle kann auf der makroskopischen Skala keine Bewegung beobachtet werden, d.h. dort sind spezifische Länge und makroskopische Geschwindigkeit konstant.
2. Es gibt eine zweite Welle, die nach rechts läuft, und der wir eindeutig eine vordere und eine hintere Front zuordnen können. Innerhalb dieser zweiten Welle entwickeln sich mikroskopische Oszillationen. Vor und hinter dieser zweiten Welle gibt es jedoch keine mikroskopischen Oszillationen.
3. Zwischen der ersten und zweiten Welle liegt ein konstanter Zustand ohne Temperatur.

Beachte, dass wir den Begriff *Welle* im Sinne der Theorie hyperbolischer Systeme verwendet haben, d.h. Wellen trennen konstante makroskopische Zustände. Insbesondere interpretieren wir den Bereich mit Temperatur als nur *eine* Welle, die aber zwei Fronten besitzt. In Abbildung 5.20 haben wir die Übergänge zwischen Wellen und konstanten Zuständen durch vertikale Linien markiert.

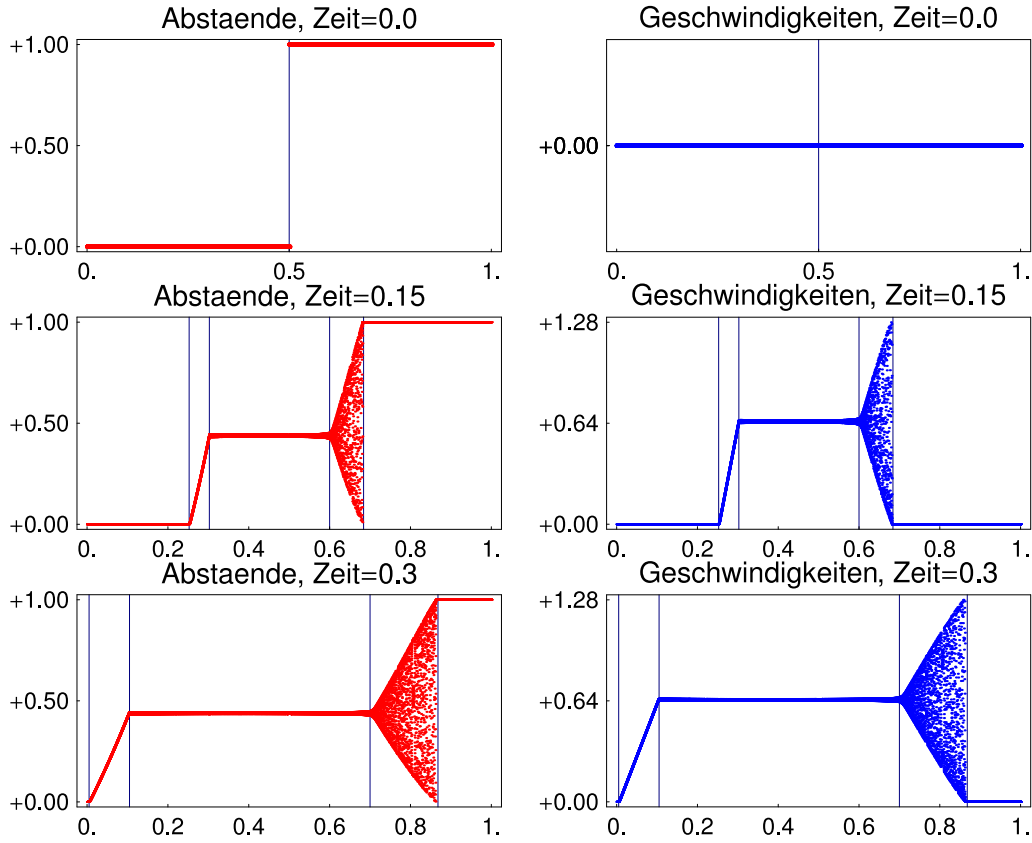


Abb. 5.20: Evolution der atomaren Daten für Beispiel *R1*, d.h. Abstände und Geschwindigkeiten für verschiedene makroskopische Zeiten über dem makroskopischen Teilchenindex. Die vertikalen Linien trennen die Wellen von den konstanten Zuständen. \diamond

In den Abbildungen 5.21 und 5.22 haben wir verschiedene makroskopische Felder zu den Zeiten $\bar{t} = 0.15$ und $\bar{t} = 0.3$ über dem makroskopischen Teilchenindex dargestellt. Wir interpretieren die Daten wie folgt:

1. Alle makroskopischen Felder besitzen selbstähnliche Profile, d.h. die Felder hängen nur von der Variablen $\bar{c} := (\bar{\alpha} - 0.5)/\bar{t}$ ab. Die Werte, die wir direkt am Stoß erhalten, sind auf Grund von Approximationsfehlern sehr ungenau.
2. In dem Bereich zwischen den Wellen, d.h. in dem neuen konstanten Zustand mit $T = 0.$, finden wir einen nicht konstanten Verlauf von Wellenzahl und Frequenz. Dies sind jedoch nur numerische Artefakte, da wir die Wellenzahl und die Frequenz als Mittelwerte von Ersatzobservablen berechnen. Beachte, dass für kalte Daten weder die TW-Wellenzahl noch die TW-Frequenz definiert sind. Ebenso ist der Sprung der Wellenzahl an der linken Front der ersten Welle ein Artefakt.
3. Innerhalb der zweiten Welle wachsen sowohl die Temperatur als auch der Entropiefluss monoton mit \bar{c} , um dann an der vorderen Front wieder auf Null zu springen.
4. Dasselbe qualitative Verhalten weisen auch die anderen Profile auf, d.h. alle makroskopischen Feldern sind glatt innerhalb der zweiten Welle und stetig an der hinteren Front, aber unstetig an der vorderen Front. In der Theorie hyperbolischer Systeme

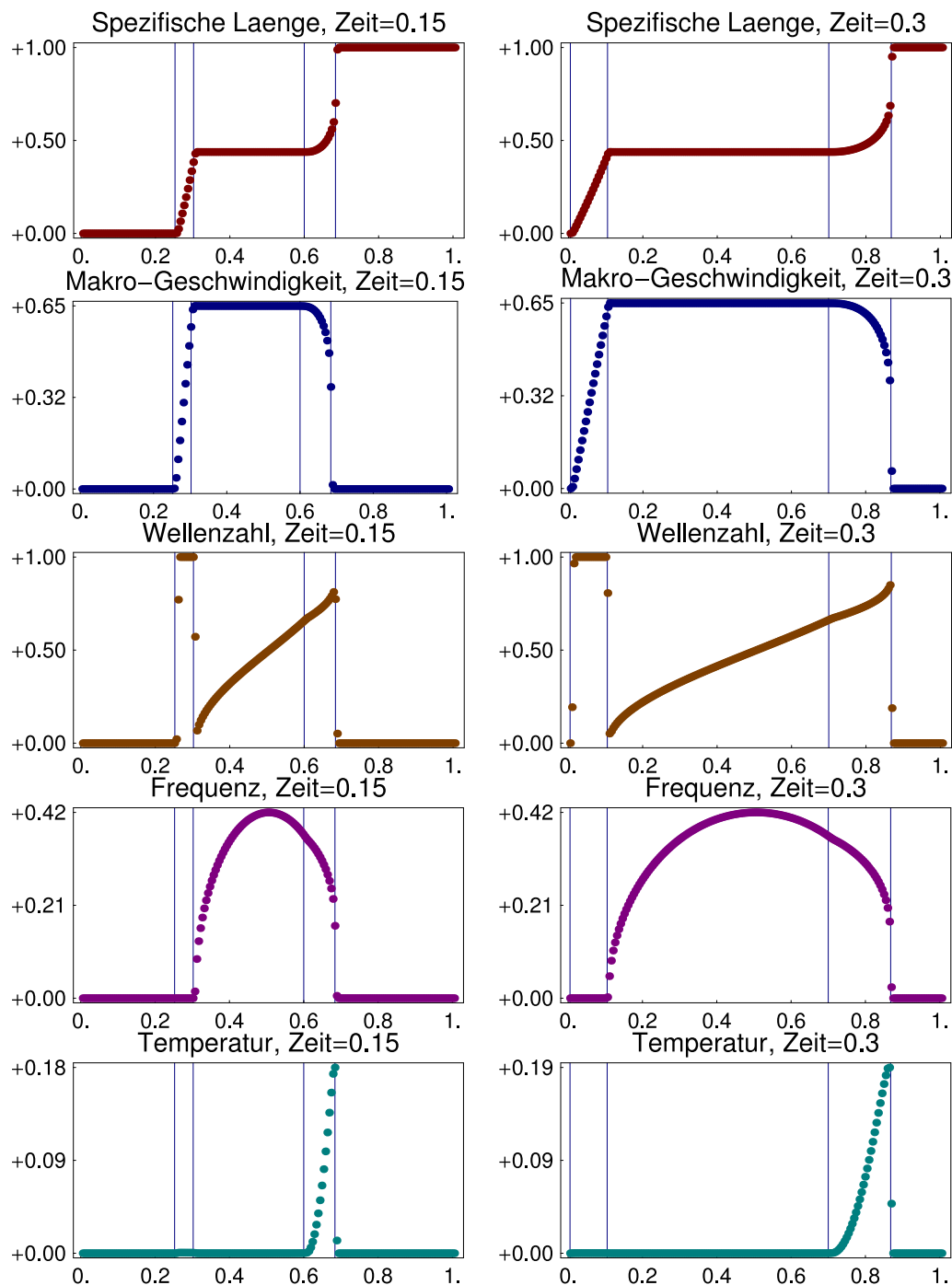


Abb. 5.21: Ausgewählte makroskopische Felder für Beispiel $R1$ zu zwei makroskopischen Zeiten über dem makroskopischen Teilchenindex. Beachte die selbstähnlichen Profile. Die vertikalen Linien trennen wieder Wellen von konstanten Zuständen. \diamond

heißten solche Wellen *zusammengesetzte Wellen* (*composite waves*), da hier eine Stoßwelle unmittelbar an eine Verdünnungswelle anschließt.

Für sechs makroskopische Punkte mit $\bar{t} = 0.3$ vergleichen wir in Abbildung 5.24 wieder die mikroskopischen Verteilungen mit den makroskopischen Vorhersagen. Wir sehen zunächst, dass innerhalb der ersten Welle, und im neuen konstanten Zustand, sich keine mikroskopischen Oszillationen entwickeln. In den vier Punkten, die innerhalb der zweiten Welle

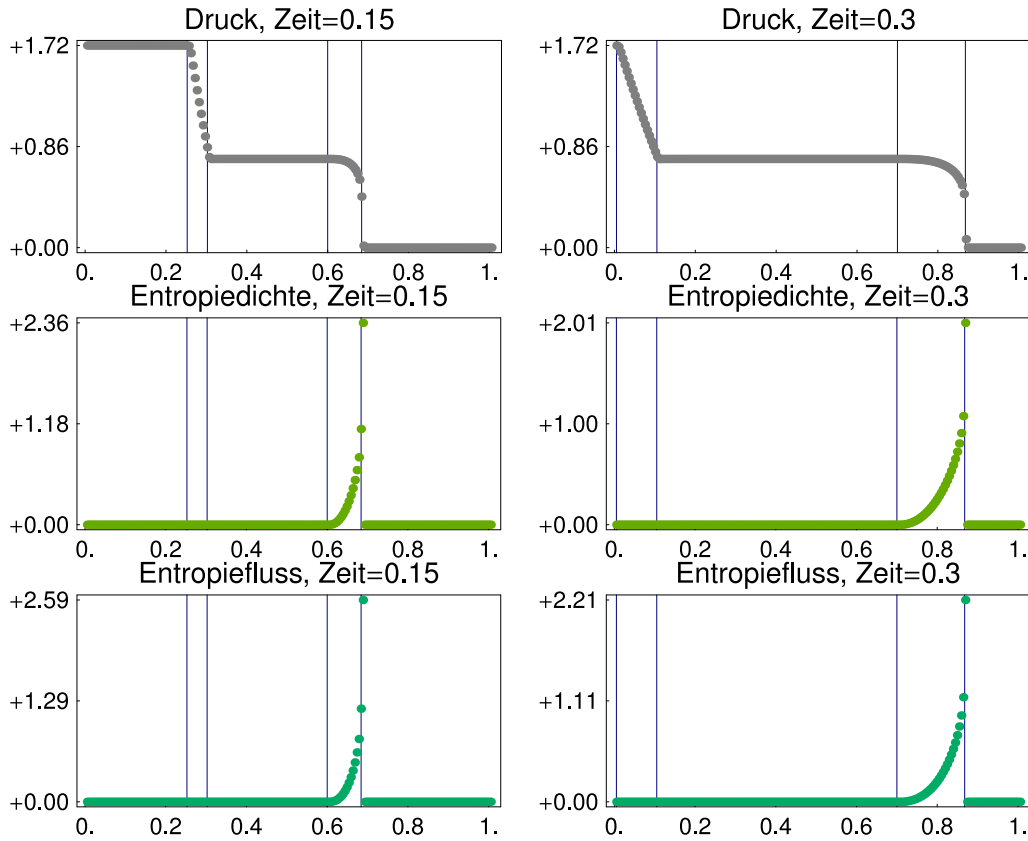


Abb. 5.22: Fortsetzung von Abbildung 5.21. Beachte, dass die Werte direkt am Stoß sehr fehlerbehaftet sind. \diamond

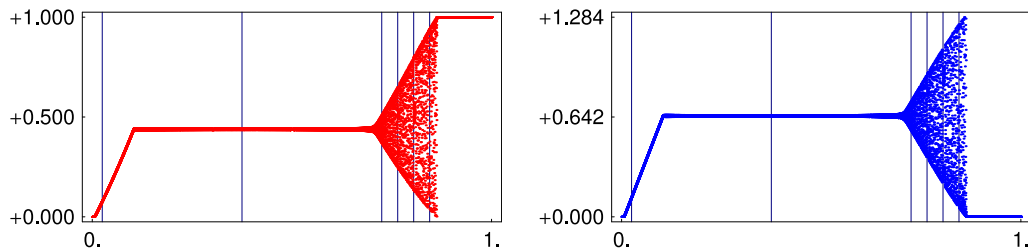


Abb. 5.23: Die vertikalen Linien markieren hier die LAGRANGE-Orte der makroskopischen Punkte, in denen die mikroskopischen Verteilungen untersucht werden, vgl. die Abbildung 5.24. Es gilt $\bar{t} = 0.3$. \diamond

liegen, beobachten wir wieder eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den mikroskopischen Verteilungen und den makroskopischen Vorhersagen. Wir schließen daraus, dass (i) mikroskopische Oszillationen, die sich aus kalten Daten entwickeln, durch modulierte Traveling-Waves beschrieben werden können, und dass (ii) die Evolution der makroskopischen Felder durch die Modulationsgleichungen (4.2.32) bestimmt ist.

Die Existenz von zusammengesetzten Wellen widerspricht der klassischen LAX-Theorie für reguläre hyperbolische Systeme (siehe Anhang A), denn gemäß dieser Theorie muss zwischen einer Verdünnungs- und einer Stoßwelle immer ein konstanter Zustand liegen. Zur Zeit können wir das Auftreten von zusammengesetzten Wellen nicht zufriedenstellend erklären.

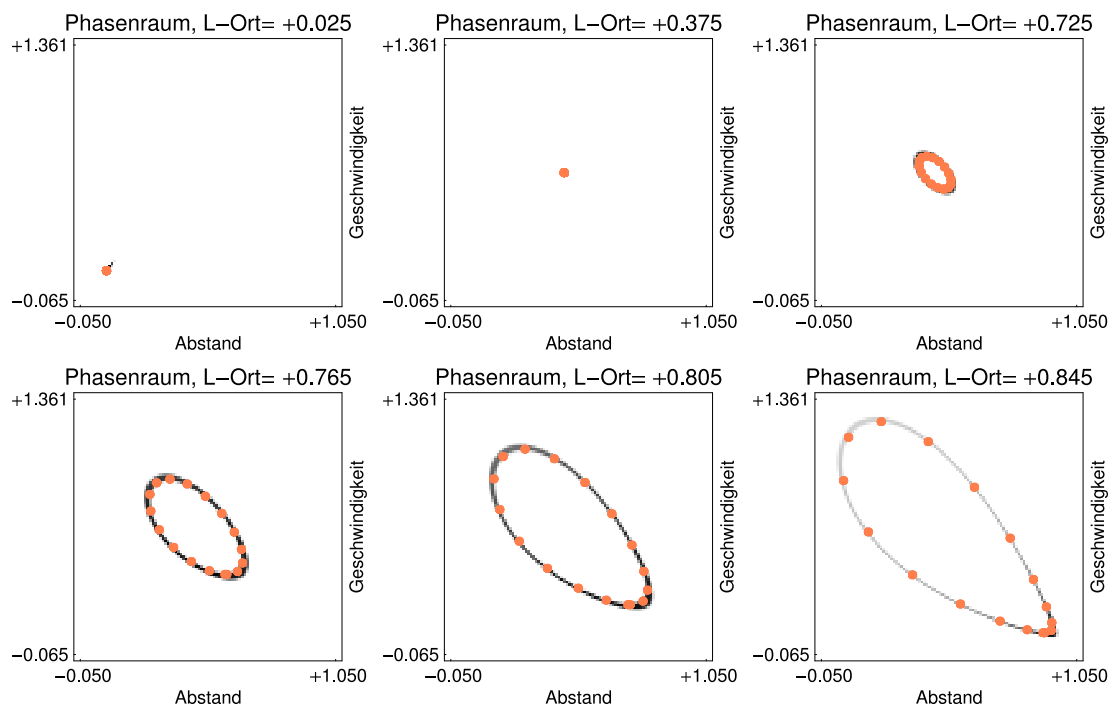


Abb. 5.24: Die lokalen Verteilungsfunktionen im mikroskopischen Phasenraum für Beispiel $R1$ in den verschiedenen makroskopischen Punkten aus Abbildung 5.23: Grau entspricht den mikroskopischen Verteilungen, Orange den makroskopischen Vorhersagen. \diamond

5.4.2 Beispiel $R2$

Im diesem Beispiel betrachten wir das Kontaktproblem zwischen zwei Teilketten, wobei in der einen Teilkette die Atome in Ruhe sind, während in der anderen die atomare Bewegung durch eine binäre Oszillation gegeben ist. Konkret setzen wir $v^{\text{ung}}(\bar{\alpha}) = v^{\text{ger}}(\bar{\alpha}) = 0$ und

$$r^{\text{ung}}(\bar{\alpha}) = \begin{cases} -1 & \text{falls } \bar{\alpha} < 0.5, \\ +1 & \text{falls } \bar{\alpha} \geq 0.5, \end{cases} \quad r^{\text{ger}}(\bar{\alpha}) = \begin{cases} +3 & \text{falls } \bar{\alpha} < 0.5, \\ +1 & \text{falls } \bar{\alpha} \geq 0.5. \end{cases}$$

Die Abbildung 5.25 zeigt die atomaren Daten für $N = 400$ zu den Zeitpunkten $\bar{t} = 0.2$

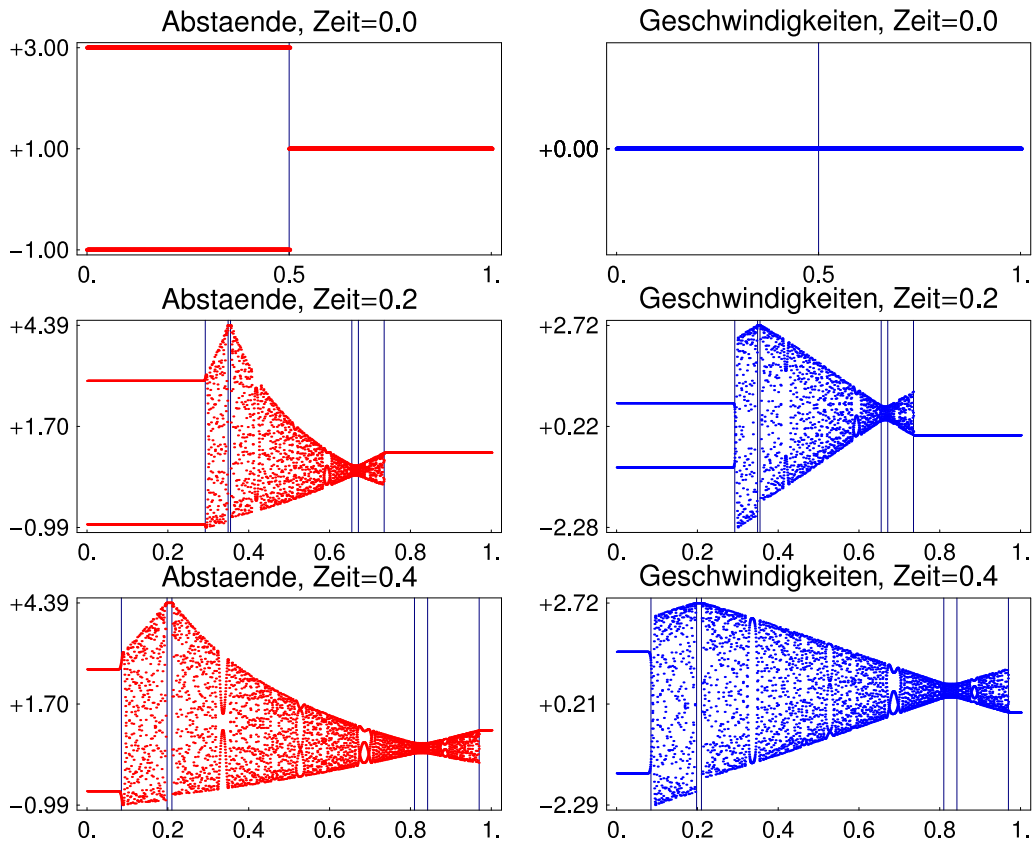


Abb. 5.25: Evolution der atomaren Daten für Beispiel $R2$, d.h. Abstände und Geschwindigkeiten für verschiedene makroskopische Zeiten über dem makroskopischen Teilchenindex. Die vertikalen Linien trennen wieder Wellen von konstanten Zuständen. \diamond

und $\bar{t} = 0.4$. Wir erkennen deutlich die Entstehung dreier Wellen mit jeweils zwei Fronten, wobei die erste Welle nach links läuft, die zweite Welle sich sowohl nach links als auch nach rechts ausbreitet, und die dritte Welle schließlich nach rechts läuft. Während zwischen der zweiten und dritten Welle deutlich sichtbar ein neuer konstanter Zustand liegt, fällt die rechtsseitige Front der ersten Welle praktisch mit der linksseitigen Front der zweiten Welle zusammen. Beachte, dass der Übergang zwischen der ersten und der zweiten Welle aber deutlich in den Einhüllenden der mikroskopischen Oszillationen erkennbar ist.

In Abbildung 5.26 haben wir verschiedene makroskopische Felder über dem makroskopischen Teilchenindex aufgetragen. Beachte, dass alle Felder wieder selbstähnliche Profile

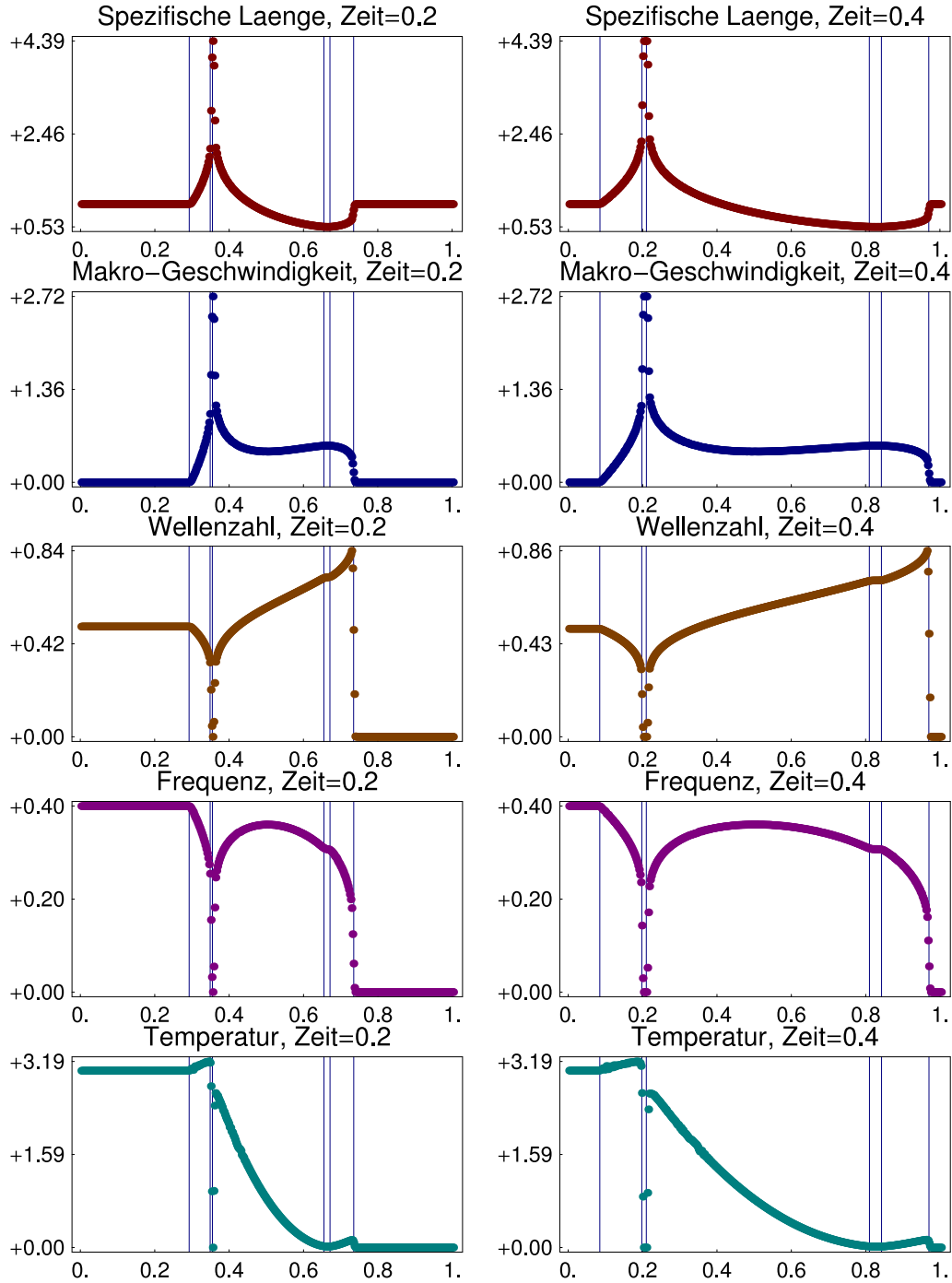


Abb. 5.26: Verschiedene makroskopische Felder für Beispiel $R2$ zu verschiedenen makroskopischen Zeiten über dem makroskopischen Teilchenindex. Beachte die selbstähnlichen Profile. Die vertikalen Linien trennen wieder Wellen von konstanten Zuständen. \diamond

besitzen, und daher nur von $\bar{c} = (\bar{\alpha} - 0.5)/\bar{t}$ abhängen. Entsprechend dem Verlauf der makroskopischen Felder klassifizieren wir alle drei Wellen als zusammengesetzte Wellen.

Auf Grund unserer Anfangsdaten wissen wir, dass die dritte Welle wieder den Anschluss an ein Gebiet mit kalten Daten herstellen muss. Das Gleiche gilt aber auch für die erste und die zweite Welle, denn in dem dazwischen liegenden konstanten Zustand gibt es keine mikroskopischen Oszillationen. Insbesondere gilt: Die Temperatur wächst mit zunehmendem \bar{c} in

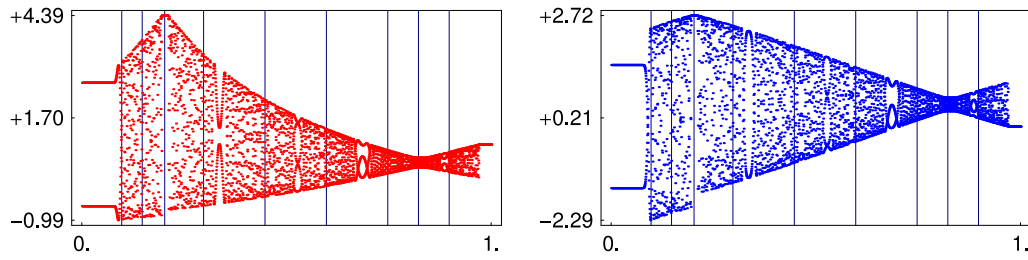


Abb. 5.27: Die vertikalen Linien markieren hier die LAGRANGE-Orte der makroskopischen Punkte, in denen die mikroskopischen Verteilungen untersucht werden, vgl. die Abbildung 5.28. Es gilt $\bar{t} = 0.4$. \diamond

der ersten Welle, springt dann auf Null, springt danach wieder hoch, um schließlich in der zweiten Welle mit wachsendem \bar{t} langsam abzufallen. Auch die anderen Felder weisen sehr starke Sprünge zwischen der ersten und zweiten Welle auf.

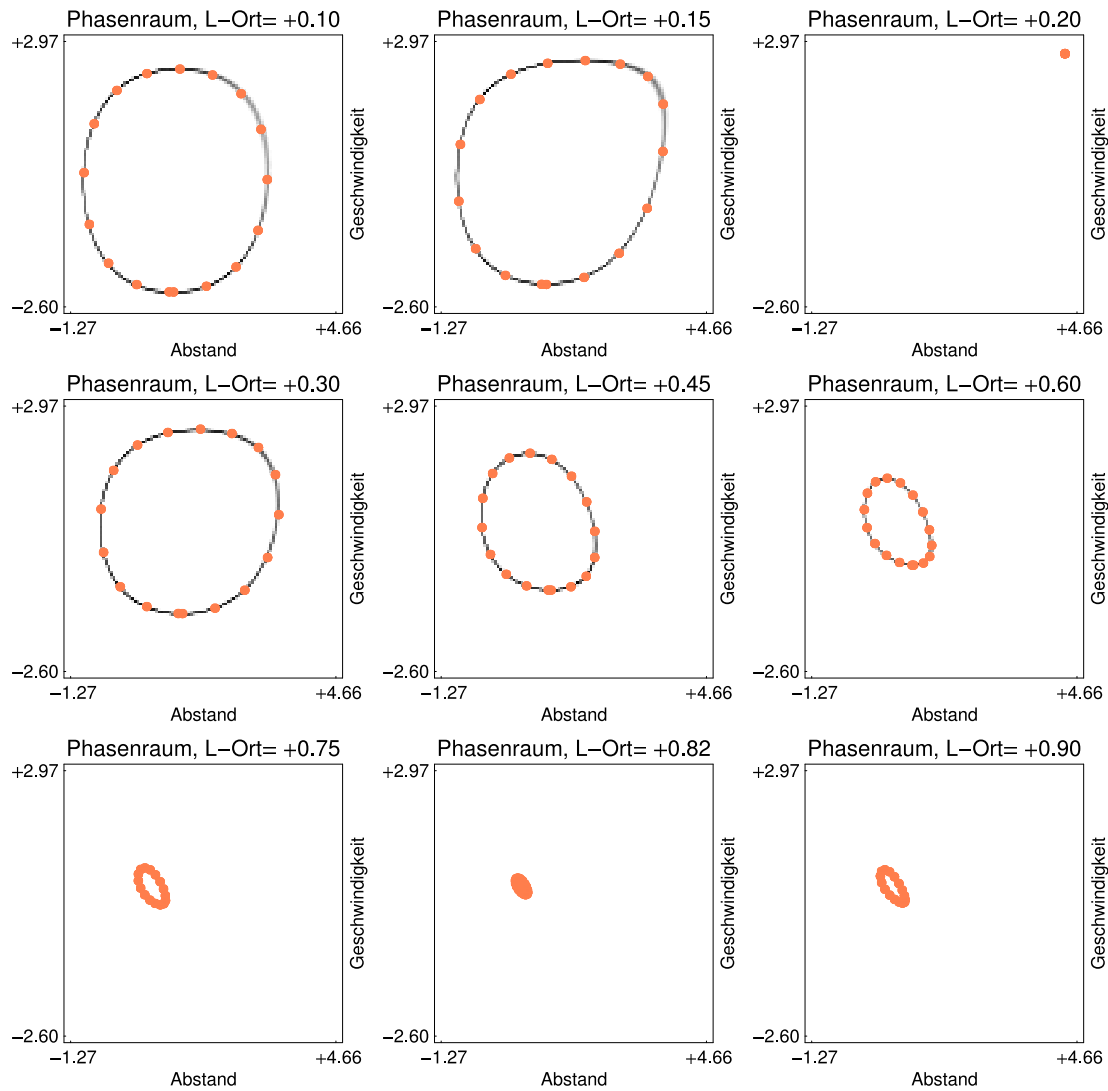


Abb. 5.28: Die lokalen Verteilungsfunktionen (Bilder 1–9) in den neun makroskopischen Punkten aus Abbildung 5.27: Grau entspricht den mikroskopischen Verteilungen, Orange den makroskopischen Vorhersagen. \diamond

N	=	4000		
ma_final_time	=	4.0E-01	mi_final_time	= 1.6E+03
mi_time_delta	=	1.0E-02	mi_time_steps	= 160000
mv_win_t_len	=	2529	mv_win_p_len	= 10
df_win_t_len	=	2529	df_win_p_len	= 20
df_win_prm	=	100		

Tab. 5.10: Die numerischen Parameter für Beispiel *R2*. \diamond

In Abbildung 5.28 vergleichen wir wieder mikroskopische Verteilungen mit makroskopischen Vorhersagen. Wie führen diesen Vergleich in ausgewählten makroskopischen Punkten zur Zeit $\bar{t} = 0.4$ durch, deren genaue Lage aus Abbildung (5.27) entnommen werden kann. Im dritten Bild sehen wir noch einmal sehr deutlich, dass in dem konstanten Zustand zwischen der ersten und zweiten Welle keine mikroskopischen Oszillationen auftreten.

Darüber hinaus finden wir wieder eine sehr gute Übereinstimmung zwischen mikroskopischen Verteilungen und makroskopischen Vorhersagen. Dies gilt in der ersten Welle (Bilder 1 und 2), in der zweiten Welle (Bilder 4 bis 7), dem dahinter liegenden konstanten Zustand (Bild 8), und schließlich auch in der dritten Welle (Bild 9).

5.4.3 Beispiel $R3$

In diesem Beispiel wollen wir ein RIEMANN-Problem betrachten, bei dem auf beiden Seiten der Anfangsunstetigkeit bereits Temperatur vorhanden ist. Dazu wählen wir in den Anfangsdaten $v^{\text{ung}}(\bar{\alpha}) = v^{\text{ger}}(\bar{\alpha}) = 0$ und

$$r^{\text{ung}}(\bar{\alpha}) = \begin{cases} 0 & \text{falls } \bar{\alpha} < 0.38, \\ 2 & \text{falls } \bar{\alpha} \geq 0.38, \end{cases} \quad r^{\text{ger}}(\bar{\alpha}) = \begin{cases} 1 & \text{falls } \bar{\alpha} < 0.38, \\ 3 & \text{falls } \bar{\alpha} \geq 0.38. \end{cases}$$

Beachte, dass sich hier die Anfangsunstetigkeit bei $\bar{\alpha} = 0.38$ befindet. Die resultierenden

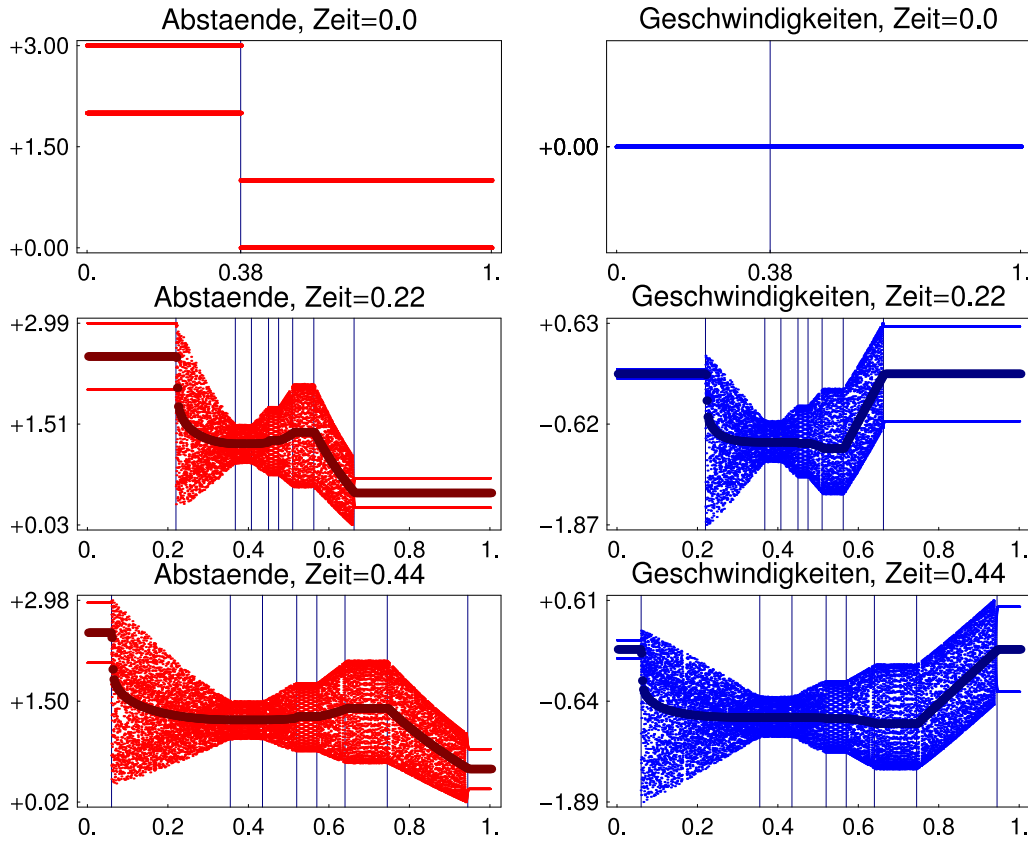


Abb. 5.29: Evolution der atomaren Daten für Beispiel $R3$, d.h. Abstände und Geschwindigkeiten für verschiedene makroskopische Zeiten über dem makroskopischen Teilchenindex. Die vertikalen Linien trennen wieder Wellen von konstanten Zuständen. \diamond

atomaren Abstände und Geschwindigkeiten sind für $N = 16000$ und $\bar{t} = 0.22$ bzw. $\bar{t} = 0.44$ in Abbildung 5.29 über dem makroskopischen Teilchenindex dargestellt. Die Abbildung 5.30 zeigt die entsprechenden Profile für ausgewählte makroskopische Felder.

Wir identifizieren vier aufeinanderfolgende Wellen, die durch konstante Zustände voneinander separiert sind. Beachte, dass wir uns bei der Festlegung der Wellenfronten in den Abbildungen 5.29 und 5.30 vor allem an den Einhüllenden der mikroskopischen Oszillationen sowie an den Profilen der spezifischen Länge und der Temperatur orientiert haben.

Zunächst wollen wir die dritte und die vierte Welle, die wir als Verdünnungswellen klassifizieren, genauer studieren. Beachte, dass sich die Temperatur innerhalb der vierten

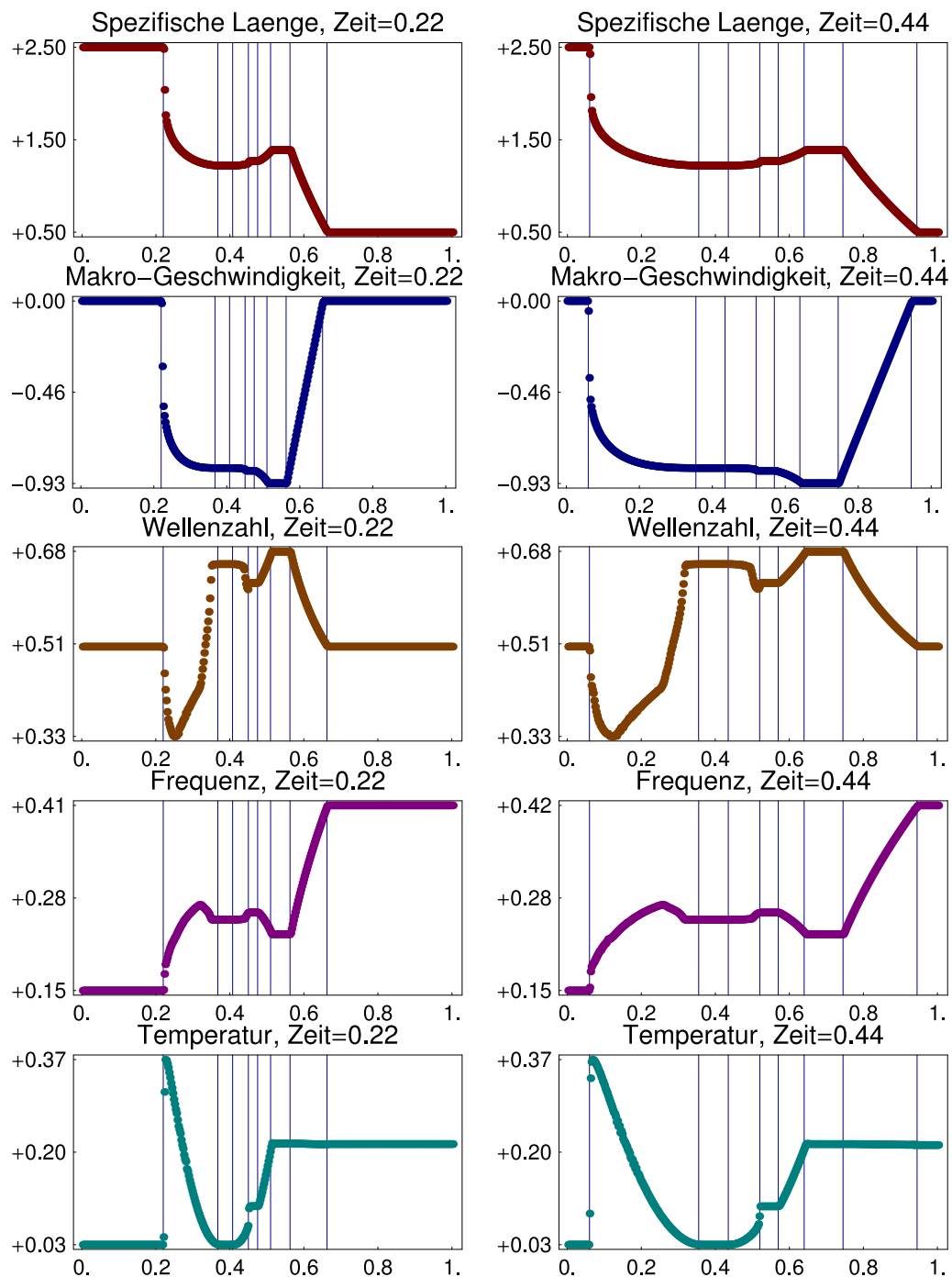


Abb. 5.30: Ausgewählte makroskopische Felder für Beispiel $R3$ zu verschiedenen makroskopischen Zeiten über dem makroskopischen Teilchenindex. Beachte die selbstähnlichen Profile. Die vertikalen Linien trennen wieder Wellen von konstanten Zuständen. \diamond

Welle nicht ändert. Wir wählen neun makroskopische Punkte hinter der zweiten Welle, vgl. Abbildung 5.31, und vergleichen in Abbildung 5.32 wieder die mikroskopischen Verteilungen mit den makroskopischen Vorhersagen. Wir schließen, dass die mikroskopischen Oszillationen hinter der zweiten Welle immer noch durch modulierte Traveling-Waves beschrieben werden können.

Die mikroskopischen Oszillationen innerhalb der ersten beiden Wellen können wir jedoch

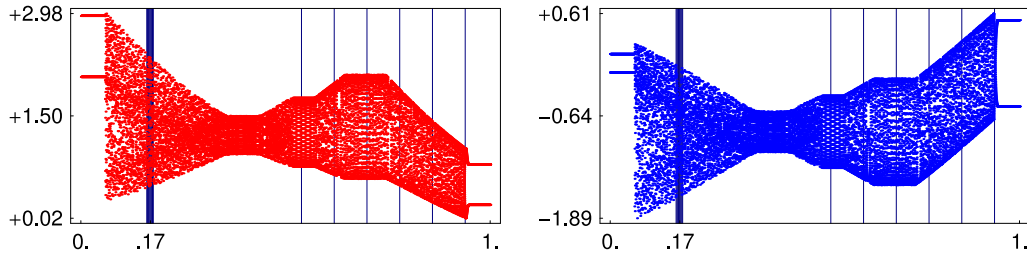


Abb. 5.31: Die vertikalen Linien markieren hier die LAGRANGE-Orte der makroskopischen Punkte, für die die mikroskopischen Verteilungen untersucht werden, vgl. die Abbildungen 5.32 und 5.33. Es gilt $\bar{t} = 0.44$. \diamond

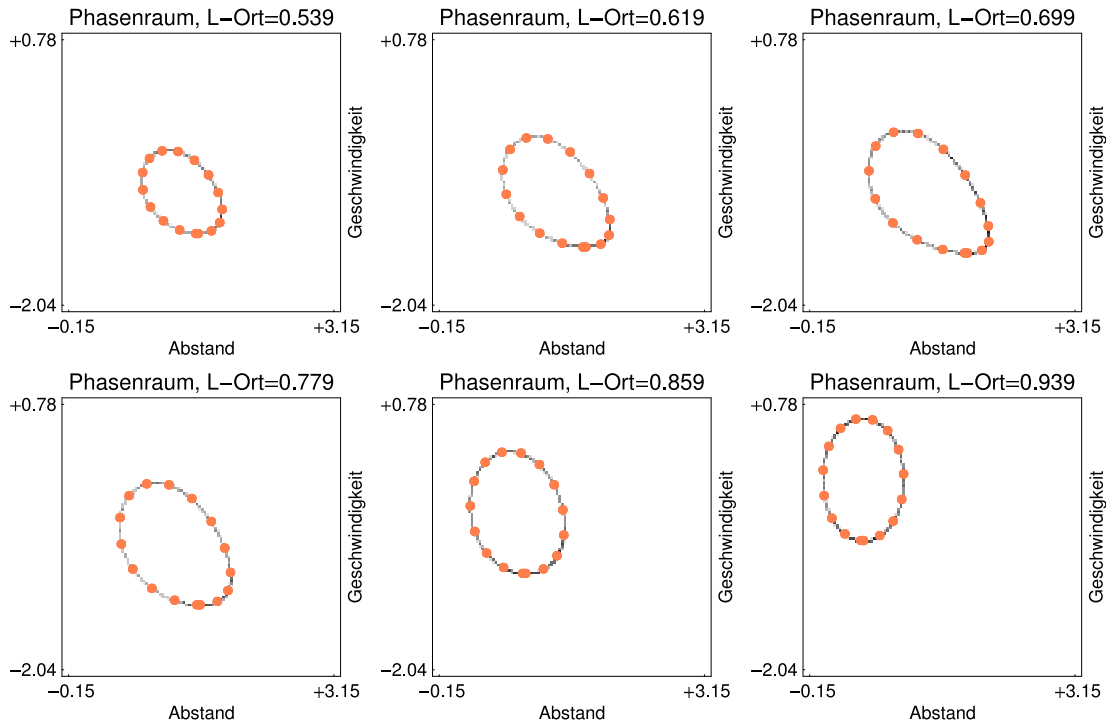


Abb. 5.32: Die lokalen Verteilungsfunktionen im mikroskopischen Phasenraum für Beispiel $R3$ in verschiedenen makroskopischen Punkten **hinter** der **zweiten** Welle, siehe Abbildung 5.31. Grau und Orange wie in Abbildung 5.33. **Interpretation:** Hier kann die Evolution mit Hilfe der Modulationsgleichungen beschrieben werden. \diamond

nicht mehr durch modulierte Traveling-Waves beschreiben. Zur Begründung dieser Aussage wollen wir die Abbildung 5.33 betrachten. Dort haben wir für neun makroskopische Punkte aus der ersten Welle, die alle dicht beieinander liegen, die Dichtegrafiken der mikroskopischen Verteilungen dargestellt. Die zu Grunde liegenden Fenster besitzen dabei nur eine Ausdehnung in der Zeit (vgl. Tabelle 5.11), d.h. die Dichtegrafiken geben die zeitliche Statistik für *ein einzelnes* Teilchen wieder. Die orangefarbenen Punkte in Abbildung 5.33 beschreiben wieder die makroskopischen Vorhersagen, die wir mit Hilfe der makroskopischen Felder aus Abbildung 5.30 gewonnen haben. Beachte, dass alle makroskopischen Vorhersagen in Abbildung 5.33 (fast) identisch sind.

Die Ein-Teilchen-Verteilungsfunktionen in der ersten Welle stimmen nicht mehr mit

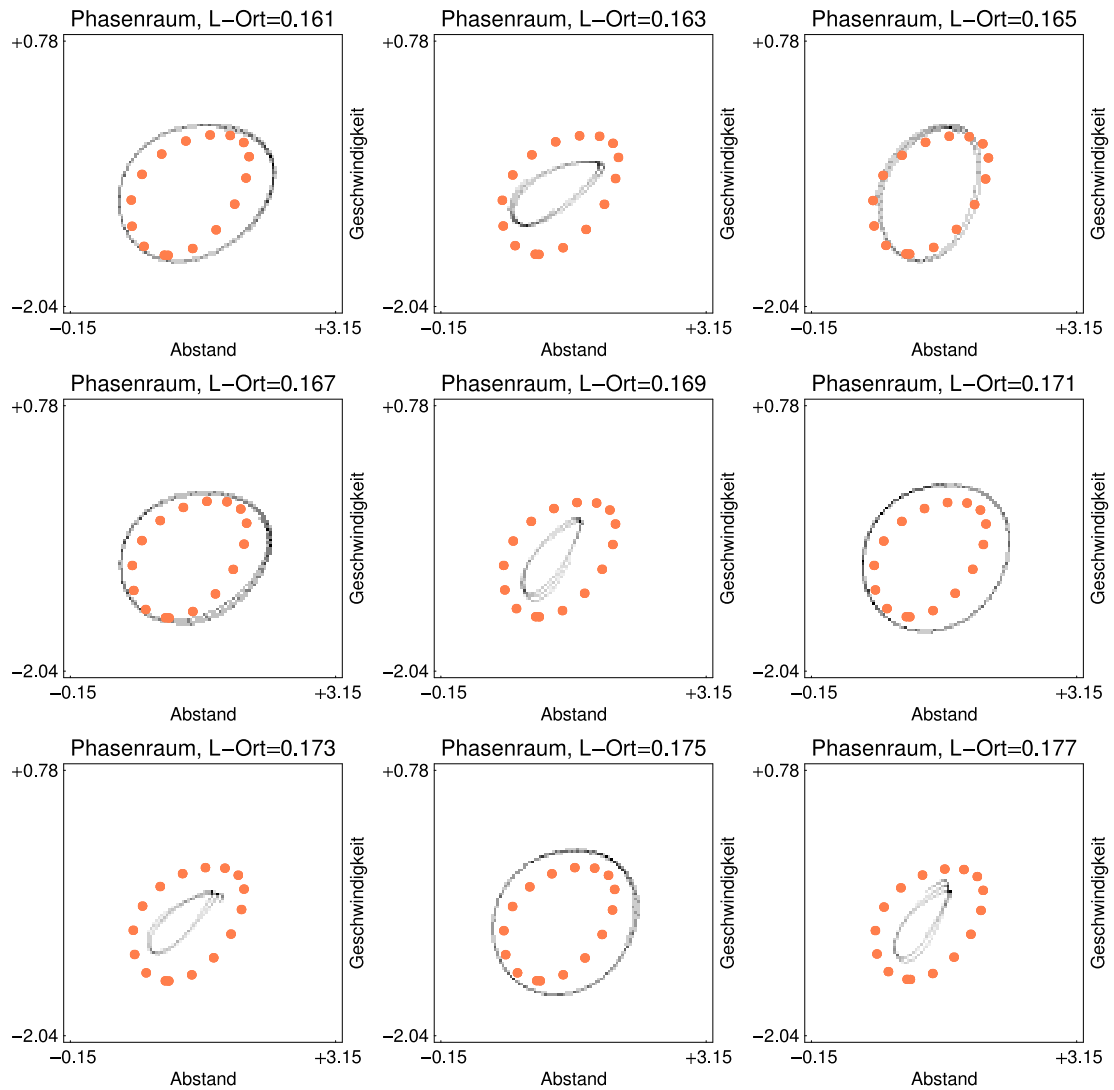


Abb. 5.33: Die lokalen Verteilungsfunktionen im mikroskopischen Phasenraum für Beispiel $R3$ in verschiedenen makroskopischen Punkten innerhalb der **ersten** Welle, siehe Abbildung 5.31: Grau entspricht den mikroskopischen Verteilungen, Orange den makroskopischen Vorhersagen. Beachte, dass die Verteilungsfunktionen die zeitliche Statistik für ein einzelnes Teilchen beschreiben. **Interpretation:** Die mikroskopischen Verteilungen oszillieren um die makroskopischen Vorhersagen. \diamond

den makroskopischen Vorhersagen überein. Vielmehr oszillieren die Ein-Teilchen-Verteilungsfunktionen um die makroskopischen Vorhersagen. Wir erwähnen, dass dies auch in der zweiten Welle gilt. Wenn wir die mikroskopischen Verteilungen mit Hilfe von Fenstern berechnen, die sehr viele Atome umfassen, so erhalten wir eine Superposition von vielen Ein-Teilchen-Verteilungsfunktionen. Das Ergebnis sind dann Verteilungsfunktionen, deren Träger positives Maß haben.

Die Daten in Abbildung 5.33 können wir so interpretieren, dass jede Ein-Teilchen-Verteilungsfunktion für sich genommen immer noch durch eine Traveling-Wave beschrieben werden kann. Aus diesem Grund vermuten wir, dass die vollständige Beschreibung der mikroskopischen Oszillationen die Einführung von WIGNER-Maßen erfordert. Wir erinnern

N	=	16000		
ma_final_time	=	4.4E−01	mi_final_time	= 7.04E+03
mi_time_delta	=	2.0E−02	mi_time_steps	= 352000
mv_win_t_len	=	2782	mv_win_p_len	= 40
df_win_t_len	=	475	df_win_p_len	= 1
df_win_prm	=	100		

Tab. 5.11: Die numerischen Parameter für Beispiel *R3*. \diamond

daran, dass mit Hilfe von WIGNER-Maßen der thermodynamische Limes der harmonischen Kette rigoros hergeleitet werden kann, vgl. Abschnitt 2.2.8 und die dort zitierten Arbeiten. Allerdings bleibt vollkommen offen, wie für nichtlineare atomare Ketten die Transportgleichung der WIGNER-Maße abzuleiten ist.

6. Schlussbemerkungen und Ausblick

Wir haben in dieser Arbeit periodische Traveling-Waves und die Modulationstheorie dazu benutzt, einen Mikro-Makro-Übergang für die atomare Kette mit Temperatur zu beschreiben. Wir haben dabei nur die hyperbolische Skalierung betrachtet und uns außerdem auf eine bestimmte Klasse von Anfangsdaten beschränkt. Allerdings haben wir in unseren Betrachtungen meistens beliebige nichtlineare, aber konvexe Wechselwirkungspotentiale zugelassen.

Obwohl wir an vielen Stellen rigorose Resultate beweisen konnten, gelang die Ableitung der Modulationsgleichungen letztlich nur formal. Verschiedene numerische Simulationen lassen uns aber vermuten, dass der thermodynamische Limes der atomaren Kette mit Temperatur in der Tat durch modulierte Traveling-Waves beschrieben werden kann.

Wir fassen noch einmal unsere Interpretation der numerischen Experimente zusammen:

1. Sofern alle makroskopischen Felder glatt bleiben können die mikroskopischen Oszillationen durch modulierte Traveling-Waves beschrieben werden.
2. Des Weiteren können wir modulierte Traveling-Waves dazu nutzen, die mikroskopischen Unstetigkeiten zu beschreiben, die sich aus kalten Anfangsdaten auf Grund von makroskopischen Unstetigkeiten entwickeln.
3. Entstehen makroskopische Unstetigkeiten in Gebieten mit Temperatur, so können wir danach die mikroskopischen Oszillationen im Allgemeinen nicht mehr durch modulierte Traveling-Waves beschreiben.

In dieser Arbeit sind eine Reihe von Problemen aufgetaucht, die wir für allgemeine Wechselwirkungspotentiale nicht oder nicht vollständig lösen konnten. Das sind unter anderem:

1. Die Zustandsgleichungen von Traveling-Waves sind nicht vollständig verstanden. Insbesondere die Auswertung der k -Abhängigkeit ist für nichtlineare Wechselwirkungspotentiale schwierig.
2. Die Eigenschaften der Modulationsgleichungen hängen letztlich nur von der Zustandsgleichung der inneren Energie $U = U(r, k, S)$ ab. Wir können nun in der Menge aller Funktionen, die von drei Parametern abhängen, die Teilmenge derjenigen Funktionen betrachten, die Zustandsgleichung eines konvexen Wechselwirkungspotentials sind. Es ist bisher nicht gelungen, diese Teilmenge näher zu beschreiben. Insbesondere wissen wir nicht, wie „groß“ diese Menge ist.

3. Es sind im Allgemeinen keine auswertbaren Bedingungen bekannt, die die (strikte) Hyperbolizität der Modulationsgleichungen gewährleisten. Auf einem formalen Level kann man zwar einen Zusammenhang mit der Stabilität von Traveling-Waves erwarten. Allerdings sind, außer im Fall kleiner Amplituden, keine solchen Stabilitätsresultate bekannt.
4. Das RIEMANN-Problem der Modulationsgleichungen bleibt im Allgemeinen unverstanden. So können wir zum Beispiel das Auftreten von zusammengesetzten Wellen nicht zufriedenstellend erklären. Insbesondere bleibt zur Zeit offen, ob deren Existenz überhaupt im Rahmen der klassischen LAX-Theorie verstanden werden kann.
5. Das allgemeine Rechtfertigungsproblem im Sinne von Abschnitt 4.3.1 bleibt ungelöst.

Einige dieser Fragen konnten wir allerdings für sehr spezielle Wechselwirkungspotentiale beantworten. Auch für das TODA-Potential können – aufgrund der vollständigen Integrierbarkeit – viele zusätzliche Informationen über den thermodynamischen Limes abgeleitet werden.

Weiterführende Untersuchungen könnten und sollten auch andere Skalierungen und/oder andere Klassen von Anfangsdaten umfassen. Erste Ergebnisse wurden dazu von DREYER und KUNIK in [DK00] erzielt. Außerdem haben beide schon erste Vorarbeiten zur *parabolischen* Skalierung

$$\bar{t} = \varepsilon^2 t, \quad \bar{\alpha} = \varepsilon \alpha, \quad \bar{x} = \varepsilon x \tag{6.0.1}$$

geleistet, ihre Ergebnisse aber leider nie veröffentlicht.

Zum Abschluss dieser Arbeit wollen wir einen ersten Ausblick auf die parabolische Skalierung geben, in dem wir das Problem der *Kontaktunstetigkeit* beschreiben. Wir folgen dabei einer Idee von DREYER und KUNIK. Das Problem ist das Folgende: Zur Zeit $\bar{t} = 0$ betrachten wir zwei halbumendliche Teilketten, in denen alle Atome thermalisiert sind (siehe [DK00]), wobei die Temperaturen der Teilketten unterschiedlich, ihre Drücke und Geschwindigkeiten aber gleich sein sollen. Auf Grund physikalischer Erwägungen erwarten wir, dass diese Anfangsdaten zu *Wärmeleitung* führen, die auf der parabolischen Zeitskala beobachtet werden kann.

Literaturverzeichnis

- [AG96] ARIOLI, G. ; GAZZOLA, F.: Periodic motion of an infinite lattice of particles with nearest neighbor interaction. In: *Nonl. Anal. TMA* 26 (1996), Nr. 6, S. 1103–1114
- [BDS83] BOLDRIGHINI, C. ; DOBRUSHIN, R. L. ; ; SUKHOV, Y. M.: One-Dimensional Hard Rod Caricature of Hydrodynamics. In: *Journ. Stat. Phys.* 31 (1983), Nr. 3, S. 577–616
- [Daf00] DAFERMOS, C. M.: *Grundlehren der mathematischen Wissenschaften*. Bd. 325: *Hyperbolic Conservation Laws in Continuum Physics*. 1. Berlin : Springer-Verlag, 2000
- [DH02] DREYER, W. ; HERRMANN, M.: Towards rigorous micro-macro transitions: The microscopic oscillator motion. In: *WIAS-Preprint* 724 (2002)
- [DH04] DREYER, W. ; HERRMANN, M.: A simplification of the stability problem for periodic traveling waves in the atomic chain. In: *AMSMSP-Preprint* 121 (2004)
- [DHM04] DREYER, W. ; HERRMANN, M. ; MIELKE, A.: Micro-Macro transition for the atomic chain via Whitham’s modulation equation. In: *AMSMSP-Preprint* 119 (2004)
- [DK00] DREYER, W. ; KUNIK, M.: Cold, thermal and oscillator closure of the atomic chain. In: *J. Phys. A: Math. Gen.* 33 (2000), S. 2097–2129
- [DKKZ74] DEIFT, P. ; KAMVISSIS, S. ; KRIECHERBAUER, T. ; ZHOU, X.: The Toda lattice II. Existence of Integrals. In: *Phys. Rev. B* 9 (1974), Nr. 4, S. 1924–1925
- [DKKZ96] DEIFT, P. ; KAMVISSIS, S. ; KRIECHERBAUER, T. ; ZHOU, X.: The Toda rarefaction problem. In: *Comm. Pure Appl. Math* 49 (1996), Nr. 1, S. 35–83
- [DKV95a] DEIFT, P. ; KRIECHERBAUER, T. ; VENAKIDES, S.: Forced Lattice Vibrations, Part I. In: *Comm. Pure Appl. Math.* 48 (1995), S. 1187–1250
- [DKV95b] DEIFT, P. ; KRIECHERBAUER, T. ; VENAKIDES, S.: Forced Lattice Vibrations, Part II. In: *Comm. Pure Appl. Math.* 48 (1995), S. 1251–1298.

- [DL88] DAUTRAY, R. ; LIONS, J.-L.: *Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology, Volumes 1–6*. Berlin : Springer Verlag, 1988
- [DM98] DEIFT, P. ; MCCLAUGHLIN, T. T-R: *Mem. Americ. Math. Soc.*. Bd. 131/624: *A continuum limit of the Toda lattice*. American Mathematical Society, 1998
- [Fla96] FLACH, S.: Tangent bifurcation of band edge plane waves, dynamical symmetry breaking and vibrational localization. In: *Physica D* 91 (1996), S. 223–243
- [FM02] FRIESECKE, G. ; MATTHIES, K.: Atomic-scale localization of high-energy solitary waves on lattices. In: *Physica D* 171 (2002), S. 211–220
- [FM03] FRIESECKE, G. ; MATTHIES, K.: Geometric solitary waves in a 2D mass spring-lattice. In: *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. B* 3 (2003), S. 105–114
- [FP99] FRIESECKE, G. ; PEGO, R. L.: Solitary waves on FPU lattices. I. Qualitative properties, renormalization and continuum limit. In: *Comm. Math. Phys.* 12 (1999), Nr. 6, S. 1601–1627
- [FPU55] FERMI, E. ; PASTA, J. ; ULAM, S.: Studis on nonlinear problems. In: *Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-1940* (1955)
- [FV99] FILIP, A.-M. ; VENAKIDES, S.: Existence and modulation of traveling waves in particle chains. In: *Comm. Pure Appl. Math.* 51 (1999), Nr. 6, S. 693–735
- [FW94] FRIESECKE, G. ; WATTIS, J. A. D.: Existence theorem for solitary waves on lattices. In: *Comm. Math. Phys.* 161 (1994), Nr. 2, S. 391–418
- [FW98] FLACH, S. ; WILLIS, C. R.: Discrete Breathers. In: *Phys. Rep.* 295 (1998), S. 181–264
- [GM04a] GIANNOULIS, J. ; MIELKE, A.: Macroscopic dynamics of an oscillator chain, described by the nonlinear Schrödinger equation. In: *AMSMSP-Preprint* 117 (2004)
- [GM04b] GIANNOULIS, J. ; MIELKE, A.: The nonlinear Schrödinger equation as a macroscopic limit for an oscillator chain with cubic nonlinearities. In: *Nonlinearity* 17 (2004), S. 551–565
- [GR96] GODLEWSKI, E. ; RAVIART, P.-A.: *Applied Mathematical Sciences*. Bd. 118: *Numerical Approximation of Hyperbolic Conservation Laws*. Berlin : Springer-Verlag, 1996
- [Hén74] HÉNON, M.: Integrals of the Toda lattice. In: *Phys. Rev. B* 9 (1974), Nr. 4, S. 1921–1923
- [HLM94] HAYS, M.H. ; LEVERMORE, C. D. ; MILLER, P.D.: Macroscopic Lattice Dynamics. In: *Physica D* 79 (1994), Nr. 1, S. 1–15

- [HLW02] HAIRER, E. ; LUBICH, Ch. ; WANNER, G.: *Springer Series in Computational Mathematics*. Bd. 31: *Geometric Numerical Integration*. 1. Berlin : Springer-Verlag, 2002
- [Hör97] HÖRMANDER, L.: *Mathématiques & Applications*. Bd. 26: *Lectures on Nonlinear Hyperbolic Differential Equations*. Paris : Springer-Verlag, 1997
- [HS78] HOLIAN, B. L. ; STRAUB, G. K.: Molecular dynamics of shock waves in one-dimensional chains. In: *Phys. Rev. B* 18 (1978), S. 1593
- [IK00] IOOSS, G. ; KIRCHGÄSSNER, K.: Travelling waves in a chain of coupled nonlinear oscillators. In: *Comm. Math. Phys.* 211 (2000), Nr. 2, S. 439–464
- [Ioo00] IOOSS, G.: Travelling waves in the Fermi-Pasta-Ulam lattice. In: *Nonlinearity* 13 (2000), S. 849–866
- [Jep65] JEPSON, D. W.: Dynamics of a Simple Many-Body System of Hard Rods. In: *Jour. Math. Phys.* 6 (1965), Nr. 3, S. 405–413
- [Kno00] KNOBEL, R.: *Students Mathematical Library*. Bd. 3: *An Introduction to the Mathematical Theory of Waves*. American Mathematical Society, 2000
- [LeF02] LEFLOCH, P. G.: *Hyperbolic Conservation Laws*. Basel : Birkhäuser, 2002 (Lectures in Mathematics: ETH Zürich)
- [Mac03] MACIÁ, F. *Wigner measures in the discrete setting: high-frequency analysis of sampling & reconstruction operators*. 2003
- [Mie04] MIELKE, A.: Macroscopic behavior of microscopic oscillations in harmonic lattices. In: *AMSMSP-Preprint* 118 (2004)
- [Pal00] PALAIS, R. S. *An Introduction to Wave Equations and Solitons*. 2000
- [PP00] PANKOV, A. A. ; PFLÜGER, K.: Traveling Waves in Lattice Dynamical Systems. In: *Math. Meth. Appl. Sci.* 23 (2000), S. 1223–1235
- [RS94] RUF, B. ; SRIKANTH, P. N.: On periodic motions of lattices of Toda type via critical point theory. In: *Rational Mech. Anal.* 126 (1994), S. 369–385
- [Ruz04] RUZICKA, M.: *Nichtlineare Funktionalanalysis*. Berlin : Springer Verlag, 2004
- [Spo91] SPOHN, H.: *Large Scale Dynamics of Interaction Particles*. Texts and Monographs in Physics. Heidelberg : Springer Verlag, 1991
- [SW00] SCHNEIDER, G. ; WAYNE, C. E.: Counter-propagating waves on fluid surfaces and the continuum limit for the Fermi-Pasta-Ulam model. In: *International Conference on Differential Equations* Bd. 1, World Scientific, 2000, S. 390–404

- [SYS97] SKEEL, R. D. ; YANG, G. ; SCHLICK, T.: A Family of symplectic Integrators: Stability, Accuracy, and Molecular Dynamics Applications. In: *SIAM J. Sci. Comput.* 18 (1997), S. 203–222
- [Tay96] TAYLOR, M. E.: *Applied Mathematical Sciences*. Bd. 117: *Partial Differential Equations III: Nonlinear Theory*. New York : Springer-Verlag, 1996
- [Tod70] TODA, M.: Waves in nonlinear lattices. In: *Prog. Theor. Phys.* 45 (1970), S. 174–200
- [Tod81] TODA, M.: *Springer Series in Solid-State Sci.*. Bd. 20: *Theory of nonlinear lattices*. Berlin : Springer, 1981
- [VDO91] VENAKIDES, S. ; DEIFT, P. ; OBA, R.: The Toda shock problem. In: *Comm. Pure Appl. Math.* (1991), S. 1171–1242
- [War99] WARNECKE, G.: *Teubner Texte zur Mathematik*. Bd. 138: *Analytische Methoden in der Theorie der Erhaltungsgleichungen*. Stuttgart&Leipzig : B.G. Teubner, 1999
- [Whi74] WHITHAM, G. B.: *Pure And Applied Mathematics*. Bd. 1237: *Linear and Non-linear Waves*. New York : Wiley Interscience, 1974
- [Zei86] ZEIDLER, E.: *Nonlinear Functional Analysis and Its Applications, Volumes I–V*. New York : Springer Verlag, 1986

A. Systeme von Erhaltungsgleichungen

Dieser Anhang fasst wichtige Begriffe aus der Theorie der hyperbolischen Erhaltungsgleichungen zusammen. Detaillierte Darstellungen dieser Theorie können [GR96], [War99], [Daf00], [LeF02] sowie den dort aufgeführten Referenzen entnommen werden.

Ein (räumlich eindimensionales) *System von d Erhaltungsgleichungen* ist ein System partieller Differentialgleichungen der Form

$$\frac{\partial U}{\partial t}(t, x) + \frac{\partial F(U)}{\partial x}(t, x) = 0, \quad (\text{A.1})$$

Hierbei nimmt U Werte in einem offenen Gebiet $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^d$ an, und die *Flussfunktion* F bildet die Menge \mathcal{D} nach \mathbb{R}^d ab. Wir setzen im Folgenden stets voraus, dass F hinreichend glatt ist. Darüber hinaus wollen wir nur solche Lösungen $U = U(t, x)$ von (A.1) betrachten, die für alle Zeiten $t \geq 0$ und für alle Orte $x \in \mathbb{R}$ definiert sind. Die Vektoren U bzw. $F(U)$ nennen wir die *Zustände* oder *Dichten* bzw. die *Flüsse* von (A.1).

Ist $U = U(t, x)$ eine Lösung von (A.1), so gilt in allen *Glattheitspunkten*, d.h. in allen Punkten (t, x) , in denen U glatt ist, die folgende Gleichheit

$$\frac{\partial U}{\partial t}(t, x) + A(U(t, x)) \frac{\partial U}{\partial x}(t, x) = 0, \quad (\text{A.2})$$

wobei A die Ableitung von F ist, d.h.

$$A(U) := \partial_U F(U). \quad (\text{A.3})$$

Die Eigenwerte $\lambda_i = \lambda_i(U)$ der Matrix $A(U)$ heißen die *charakteristischen Geschwindigkeiten* des Systems (A.1). Das System (A.1) ist *hyperbolisch*, sofern alle λ_i reell sind. Von jetzt an betrachten wir nur noch hyperbolische Systeme.

Ein hyperbolisches System ist *strikt hyperbolisch*, falls für alle $U \in \mathcal{D}$ die Werte $\lambda_i(U)$ paarweise verschieden sind. Für strikt hyperbolische Systeme wollen wir vereinbaren, dass wir die Eigenwerte der Größe nach ordnen, d.h. wir nummerieren die Eigenwerte so, dass gilt

$$\lambda_1(U) < \dots < \lambda_d(U) \quad \forall U \in \mathcal{D}. \quad (\text{A.4})$$

Des Weiteren bezeichnen wir mit $R_i(U)$ bzw. $L_i(U)$ die rechts- bzw. linksseitigen Eigenvektoren der Matrix $A(U)$, d.h.

$$A(U)R_i(U) = \lambda_i R_i(U) \quad \text{bzw.} \quad A^T(U)L_i(U) = \lambda_i L_i(U). \quad (\text{A.5})$$

Der Eigenwert λ_i heißt *echt nichtlinear* (*genuinely nonlinear*), falls

$$\partial_U \lambda_i(U) \cdot R_i(U) \neq 0 \quad \forall U \in \mathcal{D}, \quad (\text{A.6})$$

und er heißt *linear entartet* (*linearly degenerate*), falls

$$\partial_U \lambda_i(U) \cdot R_i(U) = 0 \quad \forall U \in \mathcal{D}. \quad (\text{A.7})$$

Eine Funktion h auf \mathcal{D} heißt *i-RIEMANN-Invariante*, $i = 1 \dots d$, falls gilt

$$\partial_U h(U) \cdot R_i(U) = 0 \quad \forall U \in \mathcal{D}. \quad (\text{A.8})$$

Wir sagen, das System (A.1) ist *regulär*, falls es strikt hyperbolisch ist, und falls alle Eigenwerte entweder echt nichtlinear oder linear entartet sind.

Ein Paar von Funktionen (η, ϕ) auf \mathcal{D} heißt *Erweiterung* oder auch *Entropie-Fluss-Paar* von (A.1), falls das System (A.1) in allen Glattheitspunkten den folgenden Erhaltungssatz impliziert

$$\frac{\partial \eta(U)}{\partial t}(t, x) + \frac{\partial \phi(U)}{\partial x}(t, x) = 0. \quad (\text{A.9})$$

Ist η konvex, so sprechen wir auch von einer *konvexen Erweiterung* von (A.1).

Eine wesentliche Eigenschaft hyperbolischer Erhaltungsgleichungen besteht darin, dass sie auch unstetige Lösungen zulassen, wobei für nichtlineare F sich solche unstetigen Lösungen auch aus glatten Anfangsdaten entwickeln können. Sei also U eine stückweise glatte Lösung, die längs einer Kurve $x_0(t)$ unstetig ist. Dann impliziert das System (A.1) die folgende *Sprungbedingung* längs dieser Kurve

$$-\sigma[U] + [F(U)] = 0. \quad (\text{A.10})$$

Dabei steht $\sigma = \dot{x}_0(t)$ für die *Stoßgeschwindigkeit*, und $[U]$ bezeichnet den *Sprung* von U , d.h.

$$[U](t) = \lim_{x \downarrow x_0(t)} U(t, x) - \lim_{x \uparrow x_0(t)} U(t, x). \quad (\text{A.11})$$

Der Sprung $[F(U)]$ ist durch eine analoge Formel gegeben.

Eine wichtige Klasse von Lösungen von (A.1) stellen die *selbstähnlichen* Lösungen dar. Dabei heißt eine Lösung U selbstähnlich, falls es eine Funktion $\tilde{U} = \tilde{U}(c)$ mit $c \in \mathbb{R}$ gibt, so dass

$$U(t, x) = \tilde{U}\left(\frac{x}{t}\right) \quad \forall t > 0 \quad \forall x. \quad (\text{A.12})$$

Eine selbstähnliche Lösung U heißt *Stoßwelle* (oder einfach nur *Stoß*) für $c_- < c < c_+$, falls es eine Stoßgeschwindigkeit $\sigma \in (c_-, c_+)$ gibt, so dass \tilde{U} konstant in (c_-, σ) und (σ, c_+) ist, im Punkte σ aber unstetig sein kann. Für eine Stoßwelle gilt

$$-\sigma(\tilde{U}_+ - \tilde{U}_-) + \left(F(\tilde{U}_+) - F(\tilde{U}_-)\right) = 0, \quad (\text{A.13})$$

wobei $\tilde{U}(c) = \tilde{U}_-$ für $c_- < c < \sigma$ und $\tilde{U}(c) = \tilde{U}_+$ für $\sigma < c < c_+$. Eine selbstähnliche Lösung U heißt dagegen *Verdünnungswelle* für $c_1 < c < c_2$, falls \tilde{U} in (c_1, c_2) glatt ist. Für Verdünnungswellen gilt

$$-c\tilde{U}'(c) + A(\tilde{U}(c))\tilde{U}'(c) = 0 \quad \forall c_- < c < c_+. \quad (\text{A.14})$$

Für jedes c ist $\tilde{U}'(c)$ also rechtsseitiger Eigenvektor von $A(\tilde{U}(c))$ zum Eigenwert c , d.h. es gilt

$$c = \lambda_i(\tilde{U}(c)) \quad \text{und} \quad \tilde{U}'(c) = R_i(\tilde{U}(c)) \quad (\text{A.15})$$

für i geeignet. In Abhängigkeit von i unterscheiden wir daher zwischen den verschiedenen i -Verdünnungswellen. Differenzieren wir (A.15)₁ nach c , so sehen wir mit Hilfe von (A.7), dass es für linear entartete Eigenvektoren keine entsprechenden Verdünnungswellen geben kann.

Seien U_- und U_+ zwei gegebene Zustände. Eine Funktion heißt Lösung des RIEMANN-Problems (U_-, U_+) , falls U *selbstähnlich* ist, und falls U der folgenden Anfangsbedingung genügt

$$U(0, x) = \begin{cases} U_- & \text{für } x < 0 \\ U_+ & \text{für } x > 0 \end{cases}, \quad \text{d.h.} \quad \lim_{c \rightarrow \pm\infty} \tilde{U}(c) = U_{\pm}. \quad (\text{A.16})$$

Die Lösung von RIEMANN-Problemen ist im Allgemeinen nicht eindeutig. Um Eindeutigkeit zu erzwingen, muss ein geeignetes Auswahlkriterium für Stoßwellen, die so genannte *Entropiebedingung*, formuliert werden. Für reguläre Systeme wird meistens auf die LAX-Bedingung zurückgegriffen, die sich wie folgt formulieren lässt. Eine Stoßwelle genügt der LAX-Bedingung, falls ein $i \in \{1, \dots, d\}$ existiert, so dass

1. für linear entartete λ_i gilt $\lambda_i(\tilde{U}_-) = \sigma = \lambda_i(\tilde{U}_+)$,
2. für echt nichtlineare λ_i gilt

$$\lambda_{i-1}(\tilde{U}_-) < \sigma < \lambda_i(\tilde{U}_-) \quad \text{und} \quad \lambda_i(\tilde{U}_+) < \sigma < \lambda_{i+1}(\tilde{U}_+),$$

wobei $\lambda_{d+1} := +\infty$ und $\lambda_0 := -\infty$ vereinbart sei.

In Abhängigkeit von i unterscheiden wir zwischen den verschiedenen i -LAX-Stößen. Ist λ_i linear entartet, so nennen wir den entsprechenden i -LAX-Stoß auch *Kontaktunstetigkeit*. Für reguläre Systeme ist die Lösung eines RIEMANN-Problems vollständig bekannt.

Theorem A.1 *Sei das System (A.1) regulär, sei U_- gegeben, und sei U_+ hinreichend nahe bei U_- . Dann existiert genau eine Lösung des RIEMANN-Problems (U_-, U_+) mit folgenden Eigenschaften. Es existiert ein $1 \leq J \leq d$ und $J + 1$ konstante Zustände*

$$U_0 = U_-, U_1, \dots, U_{J-1}, U_J = U_+, \quad (\text{A.17})$$

zusammen mit J natürlichen Zahlen

$$1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_J \leq d, \quad (\text{A.18})$$

so dass die Zustände U_{j-1} und U_j durch eine i_j -Welle getrennt sind. Dabei ist die i_j -Welle

- 1. eine Kontaktunstetigkeit, falls λ_{i_j} linear entartet ist,*
- 2. entweder eine i_j -Verdünnungswelle oder ein i_j -LAX-Stoß, falls λ_{i_j} echt nichtlinear ist.*

Wie schließen mit folgenden Bemerkungen:

1. Das RIEMANN-Problem kodiert alle wesentlichen Eigenschaften eines hyperbolischen Systems (A.1). Insbesondere können mit Hilfe so genannter RIEMANN-Löser numerische Schemata zur Lösung von (A.1) abgeleitet werden (GODUNOV-Schemata).
2. Neben der LAX-Bedingung sind auch andere Entropiekriterien sinnvoll. Besitzt das System (A.1) eine konvexe Erweiterung (η, ϕ) , so können Stoßwellen dadurch ausgewählt werden, dass man nur Stöße mit negativer Entropieproduktion zulässt, d.h. man fordert

$$-\sigma[\![\eta(\tilde{U})]\!] + [\![\phi(\tilde{U})]\!] \leq 0. \quad (\text{A.19})$$

In jedem Fall sollte eine Entropiebedingung gewählt werden, mit deren Hilfe die RIEMANN-Probleme eindeutig lösbar sind.

3. Der in Theorem (A.1) formulierte RIEMANN-Löser stellt nur den denkbar einfachsten Fall dar. Für nicht reguläre Systeme (A.1) kann die allgemeine Struktur von RIEMANN-Lösungen wesentlich komplizierter sein.

B. YOUNG-Maße

In diesem Anhang stellen wir einige Ergebnisse aus der Theorie der YOUNG-Maße bereit, die wir in Kapitel 2 verwendet haben. Wir beginnen mit den grundlegenden Begriffen und formulieren die wesentlichen Sätze, die für uns von Interesse sind.

Für eine detaillierte Darstellung der Theorie der YOUNG-Maße verweisen wir auf [War99], [Tay96], [Hör97] sowie auf die dort aufgeführten Referenzen.

In diesem Anhang bezeichnen wir mit \mathbb{R} die Menge der reellen Zahlen (und nicht etwa eine Profilkfunktion). Weiterhin sei G ein beschränktes Gebiet des \mathbb{R}^2 , M eine natürliche Zahl, und s sei ein Exponent aus $(1, \infty]$. Wir werden die Punkte aus G mit z und die Elemente aus \mathbb{R}^M mit Q bezeichnen. In unseren Anwendungen ist G immer ein Rechteck in der makroskopischen LAGRANGE-Raum-Zeit, d.h. $G = [0, \bar{t}_{\text{end}}] \times [0, 1]$ und $z = (\bar{t}, \bar{\alpha})$. Mit $L^s(G; \mathbb{R}^M)$ bezeichnen wir den Raum aller \mathbb{R}^M -wertigen Funktionen P auf G , für die $|P| \in L^s(G)$ gilt.

Ein YOUNG-Maß μ auf G ist eine messbare Abbildung

$$\mu : G \rightarrow \text{Prob}(\mathbb{R}^M). \quad (\text{B.1})$$

Hierbei ist $\text{Prob}(\mathbb{R}^M)$ die Menge aller Wahrscheinlichkeitsmaße auf \mathbb{R}^M , d.h. jedes $\nu \in \text{Prob}(\mathbb{R}^M)$ ist ein positives RADON-Mass auf \mathbb{R}^M mit

$$\int_{\mathbb{R}^M} \nu(dQ) = 1. \quad (\text{B.2})$$

Wir schreiben statt μ auch

$$\mu(z, dQ). \quad (\text{B.3})$$

Für $s \in (1, \infty)$ definieren wir eine Menge $\mathcal{C}_s(\mathbb{R}^M)$ stetiger Funktionen wie folgt: Eine stetige Funktion Ψ auf \mathbb{R}^M ist Element von $\mathcal{C}_s(\mathbb{R}^M)$ genau dann, wenn wir für jedes $\varepsilon > 0$ ein $\kappa_\varepsilon \in \mathbb{R}$ finden, so dass

$$|\Psi(Q)| \leq \varepsilon |Q|^s \quad \text{falls} \quad |Q| > \kappa_\varepsilon. \quad (\text{B.4})$$

Wir formulieren zwei hinreichende Bedingungen dafür, dass eine Funktion Ψ in $\mathcal{C}_s(\mathbb{R}^M)$ liegt:

1. Ψ geht im Unendlichen auf Null, oder
2. es gibt zwei Konstanten $a, b \in \mathbb{R}$ sowie ein $r \in (1, \infty)$, so dass

$$|\Psi(Q)| \leq a + b|Q|^{s/r}. \quad (\text{B.5})$$

Außerdem setzen wir

$$\mathcal{C}_\infty(\mathbb{R}^M) := \mathcal{C}(\mathbb{R}^M). \quad (\text{B.6})$$

Wir sagen, eine Folge $i \mapsto P_i$ aus $L^s(G; \mathbb{R}^M)$ konvergiert gegen ein YOUNG-Maß μ , falls für alle Funktionen $\Psi \in \mathcal{C}_s(\mathbb{R}^M)$ gilt:

$$\Psi(P_i) \rightharpoonup [\mu, \Psi] \quad \text{schwach in } L^1(G), \quad (\text{B.7})$$

wobei

$$[\mu, \Psi](z) := \int_{\mathbb{R}^M} \Psi(Q) \mu(z, dQ) \quad \text{für fast alle } z \in G. \quad (\text{B.8})$$

Die für unsere Zwecke wichtigste Eigenschaft von YOUNG-Maßen ist:

Theorem B.1 *Sei $i \mapsto P_i$ eine in $L^s(G; \mathbb{R}^M)$ beschränkte Folge. Dann existiert eine Teilfolge $j \mapsto P_{i_j}$ und ein YOUNG-Maß μ , so dass $j \mapsto P_{i_j}$ gegen μ in o.g. Sinne konvergiert.*

Selbständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und ohne unerlaubte Hilfe angefertigt habe.

Michael Herrmann

10. Juli 2004